

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS MARINAS
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES OCEANOLÓGICAS

DOCTORADO EN CIENCIAS EN OCEANOGRAFIA COSTERA



PROPIEDADES ÓPTICAS DE LA BAHÍA DE TODOS SANTOS, BAJA CALIFORNIA, MÉXICO: APLICACIÓN A LA PERCEPCIÓN REMOTA DEL COLOR DEL OCÉANO

T E S I S

QUE PARA CUBRIR PARCIALMENTE LOS REQUISITOS NECESARIOS PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS EN OCEANOGRAFÍA COSTERA

PRESENTA

MARIANA STEPHANIE LARIOS MUÑIZ

Ensenada, Baja California, México

Junio 2025

FACULTAD DE CIENCIAS MARINAS
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES OCEANOLÓGICAS
POSGRADO EN OCEANOGRAFÍA COSTERA

PROPIEDADES ÓPTICAS DE LA BAHÍA DE TODOS SANTOS, BAJA CALIFORNIA,
MÉXICO: APLICACIÓN A LA PERCEPCIÓN REMOTA DEL COLOR DEL OCÉANO

T E S I S

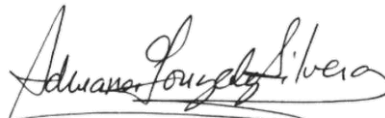
QUE PARA CUBRIR PARCIALMENTE LOS REQUISITOS NECESARIOS PARA
OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS EN OCEANOGRAFÍA COSTERA

Presenta

MARIANA STEPHANIE LARIOS MUÑIZ

Aprobada por:



Dra. Adriana Gisel Gonzalez Silvera
Directora de tesis



Dr. Eduardo Martin Santamaría del Ángel

Sinodal



Dr. Jorge Manuel López Calderón

Sinodal



Dra. Mónica Torres Beltrán

Sinodal



Dra. Stella Patricia Betancur Turizo

Sinodal



Dra. Alejandra de Jesús Castillo Ramírez

Sinodal

Resumen

En este trabajo se evaluaron las propiedades ópticas de la Bahía de Todos Santos (Baja California, México), así como la precisión de las estimaciones de la reflectancia marina ($R_{rs}(\lambda)$) y de la concentración de clorofila *a* (Chla) obtenidas por sensores remotos y su relación con estas propiedades, a partir de una base de datos recopilada entre el 2016 y el 2023. El objetivo general fue caracterizar las propiedades ópticas de la bahía con la finalidad de evaluar su relación con la percepción remota del color del océano mediante la integración de datos radiométricos obtenidos *in situ* y por sensores remotos. Para esto, se desarrollaron cuatro objetivos específicos: (1) Describir la variabilidad promedio (o línea base) de las propiedades ópticas en la bahía; (2) Describir las propiedades ópticas de florecimientos fitoplanctónicos como herramienta para su detección utilizando sensores remotos; (3) Comparar los productos satelitales reflectancia marina ($R_{rs}(\lambda)$) y Chla derivados de los sensores OLCI-Sentinel 3A, VIIRS-SNPP y VIIRS-JPSS1 contra la información medida *in situ* y (4) Evaluar el desempeño de algoritmos globales y regionales utilizando las $R_{rs}(\lambda)$ medidas *in situ*. Los dos primeros objetivos permitieron establecer una línea base que define los intervalos usuales de variación de la Chla (0.11 a 6.2 mg m⁻³), y de los coeficientes de absorción de luz por el fitoplancton (0.019 a 0.284 m⁻¹), partículas no algales (0.006 a 0.14 m⁻¹) y la materia orgánica disuelta cromofórica (0.002 a 0.029 m⁻¹). Esto, a su vez permitió la propuesta de un modelo para la detección de florecimientos algales de dinoflagelados (*Lingulodinium polyedra* y *Prorocentrum micans*), con base en sus características de absorción en el ultravioleta del espectro electromagnético. Los resultados de los dos siguientes objetivos remarcaron que la Chla derivada de los sensores remotos OLCI y VIIRS sobreestiman la Chla *in situ* (88% a 445%), asociado a una subestimación de la $R_{rs}(\lambda)$ medida por estos sensores relacionado a los procedimientos de corrección atmosférica. Sin embargo, al usar las $R_{rs}(\lambda)$ medidas *in situ*, se pudo determinar que los algoritmos mejoran su precisión y disminuyen su porcentaje de sobreestimación. Entre estos, el algoritmo global OC3V presentó un porcentaje de sobreestimación de 82%, mientras el regional de 52%. A pesar del mejor desempeño del algoritmo regional, se recomienda trabajar en su optimización para adecuarlo a las condiciones ópticas de las aguas de la Bahía de Todos Santos.

Palabras clave: Bahía de Todos Santos; propiedades ópticas; coeficientes de absorción de luz; sensores remotos; algoritmos

Abstract

This study evaluated the optical properties of Todos Santos Bay (Baja California, Mexico), as well as the accuracy of the remote sensing reflectance ($R_{rs}(\lambda)$) and chlorophyll-a (Chla) concentration estimates derived from remote sensing, and their relationship with these optical properties, based on a dataset collected between 2016 and 2023. The main objective was to characterize the optical properties of Todos Santos Bay with the aim of assessing their applicability to ocean color remote sensing through the integration of *in situ* and remotely sensed radiometric data. Four specific objectives were pursued: (1) To describe the average variability (baseline) of the bay's optical properties; (2) To characterize the optical properties of phytoplankton blooms as a tool for their detection using remote sensors; (3) To compare satellite-derived marine reflectance ($R_{rs}(\lambda)$) and Chla products from the OLCI-Sentinel 3A, VIIRS-SNPP, and VIIRS-JPSS1 sensors against *in situ* measurements; and (4) To evaluate the performance of global and regional algorithms using *in situ* $R_{rs}(\lambda)$ data. The first two objectives allowed for the establishment of a baseline defining the typical variation ranges of Chla concentrations (0.11 to 6.2 mg m⁻³) and particle light absorption coefficients: $a_{phy}(440)$ (0.019 to 0.284 m⁻¹), $a_{NAP}(440)$ (0.006 to 0.14 m⁻¹), and colored dissolved organic matter, $a_{CDOM}(440)$ (0.002 to 0.029 m⁻¹). This baseline enabled the development of a model for the detection of dinoflagellate blooms (*Lingulodinium polyedra* and *Prorocentrum micans*), based on their characteristic absorption features in the ultraviolet region of the electromagnetic spectrum. Results from the latter two objectives revealed that Chla estimates derived from the OLCI and VIIRS sensors tend to overestimate *in situ* Chla concentrations by 88% to 445% associated to an underestimation of $R_{rs}(\lambda)$ likely due to atmospheric correction procedures. However, when using *in situ* $R_{rs}(\lambda)$ measurements, the accuracy of the algorithms improved, and the degree of overestimation was reduced. Among the tested algorithms, the global OC3V algorithm overestimated Chla by 82%, whereas the regional algorithm reduced this to 52%. Despite the superior performance of the regional algorithm, further optimization is recommended to tailor it to the specific optical conditions of the waters in Todos Santos Bay.

Key words: Todos Santos Bay; optical properties; light absorption coefficients; remote sensors; algorithms

Índice

RESUMEN	3
ABSTRACT	4
ÍNDICE	5
ÍNDICE DE TABLAS	9
ÍNDICE DE FIGURAS.....	10
LISTA DE ABREVIATURAS	12
LISTA DE ECUACIONES	14
1. Introducción General.....	16
2. Objetivo general	23
3. Objetivos Específicos.....	23
4. Capítulo 1. Propiedades de absorción de luz de los florecimientos de dinoflagelados en la Bahía de Todos Santos, México (Océano Pacífico Nororiental).	24
4.1 Resumen	24
4.2 Abstract	25
4.3 Introducción.....	25
4.4 Metodología.....	26
4.4.1 Área de estudio	26
4.4.2 Muestreo en campo	26
4.4.3 Coeficientes de absorción.....	26
4.4.4 Determinación de la pendiente espectral	28
4.4.5 Concentración de Chla	28
4.4.6 Análisis estadísticos	28
4.4.7 Observaciones al microscopio	28
4.5 Resultados	28
4.5.1 Propiedades ópticas generales	28
4.5.2 Línea base de las propiedades ópticas	29
4.5.3 Propiedades ópticas de los florecimientos de dinoflagelados	30
4.6 Discusión	32
4.6.1 Línea base de las propiedades ópticas	32
4.6.2 Propiedades de absorción de luz de los florecimientos de dinoflagelados	34

4.7 Conclusiones: Implicaciones para la detección remota de florecimientos de dinoflagelados	34
4.8 Referencias	35
5. Capítulo 2. Evaluación del Desempeño de Imágenes Satelitales y Algoritmos de Color del Océano en una bahía costera del Pacífico Nororiental: Análisis Comparativo del OLCI (Sentinel-3A) y VIIRS (SNPP y JPSS1)	38
5.1 Resumen	38
5.2 Abstract	39
5.3 Introducción	40
5.4 Metodología	44
5.4.1 Área de estudio	44
5.4.2 Fuente de Datos	47
5.4.2.1 Campañas de Muestreo	47
5.4.2.2 Mediciones Radiométricas	48
5.4.2.3 Concentración de Chla	51
5.4.2.4 Imágenes de Satélite	51
5.4.3 Evaluación de los productos estándar	52
5.4.4 Evaluación de los algoritmos	54
5.5 Resultados	55
5.5.1 Variabilidad radiométrica <i>in situ</i>	55
5.5.2 Evaluación estándar de los productos satelitales	58
5.5.2.1 Comparaciones de la Chla	58
5.5.2.2 Comparaciones de la $R_{rs}(\lambda)$	59
5.5.3 Evaluación de los algoritmos	61
5.6 Discusiones	63
5.6.1. Variabilidad óptica	63
5.6.2 Evaluación de los productos satelitales	65
5.6.3 Evaluación de los algoritmos	68
5.7 Conclusiones	70
5.8 Referencias	71
6. Conclusiones generales	78
MATERIAL SUPLEMENTARIO: CAPÍTULO 1	80
MATERIAL SUPLEMENTARIO: CAPÍTULO 2	87

Dedicatoria

A mis padres, hermana y sobrino.

AGRADECIMIENTOS

Le agradezco infinitamente a mi comité de tesis por haberme dado la oportunidad de vivir la invaluable experiencia que conlleva el desarrollar un trabajo doctoral.

A mi directora de tesis, la Dra. Adriana Gonzalez Silvera por elegir ser mi mentora a lo largo de mi desarrollo académico desde la licenciatura y por invitarme a desarrollar este proyecto. Sobre todo, por su paciencia y comprensión a lo largo del trayecto. ¡GRACIAS!

Le agradezco al Dr. Eduardo Santamaría por continuar monitoreando mi trabajo con el foco de su experiencia. La estadística sigue siendo mi hueso duro de roer, pero ha logrado mantener mi interés en las matemáticas. ¡GRACIAS!

Al Dr. Jorge López Calderón porque siempre estuvo presente, atento y dispuesto a los requerimientos del trabajo, además de su apoyo en el procesamiento de las muestras de HPLC. ¡GRACIAS!

A la Dra. Mónica Torres por haberme acompañado y encaminado en la exploración de los sensores. Por su disposición y aportaciones al trabajo desde la perspectiva y el enfoque externo. ¡GRACIAS!

A la Dra. Stella Betancur, por su dedicación y tiempo invertido en este trabajo, y por sus valiosos comentarios durante las reuniones semestrales. ¡GRACIAS!

A la Dra. Alejandra Castillo, porque llegó en el momento preciso a sacudirme y acomodarme las ideas. Por aquellos momentos de motivación y claridad mental tan indispensables. ¡GRACIAS!

Sin duda alguna cada uno de ustedes se ha ganado mi admiración y cariño. ¡Muchas gracias!

A la beca proporcionada SECIHTI durante la duración del programa de doctorado y al apoyo brindado por el proyecto CF-2019-13277141 y a las organizaciones POGO y Nippon Foundation (Proyecto NANO-DOAP, <https://nf-pogo-alumni.org/projects/global/>).

Índice de tablas

Introducción general. Tabla 1. Características generales de los satélites y sensores de color del océano activos actualmente. Información tomada de https://oceancolor.gsfc.nasa.gov/ y https://sentinels.copernicus.eu/web/sentinel/copernicus/sentinel-3	20
Capítulo 1. Tabla 1. Fechas de muestreos. Las fechas en negritas indican que ocurrió evento de florecimiento durante el muestreo. En DB1, los coeficientes de absorción del material particulado incluyen mediciones en la parte visible del espectro electromagnético (400–700 nm), mientras que en DB2 incluyen también la parte ultravioleta del espectro (250–400 nm).	27
Capítulo 1. Tabla 2. Intervalo de variación, mediana, y número de muestras (n) para la concentración de clorofila <i>a</i> (Chl <i>a</i>) (mg m^{-3}); coeficientes de absorción de luz del fitoplancton [$a_{\text{phy}}(440)$] (m^{-1}), materia orgánica disuelta cromofórica [CDOM; $a_{\text{CDOM}}(440)$] (m^{-1}), partículas no algales [$a_{\text{NAP}}(440)$] (m^{-1}); y pendientes espectrales del $a_{\text{phy}}(\lambda)$ [S_{phy}] (nm^{-1}), $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ [S_{CDOM}] (nm^{-1}), $a_{\text{NAP}}(\lambda)$ [S_{NAP}] (nm^{-1}), y sumatoria del $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ y $a_{\text{NAP}}(\lambda)$ [S_{dg}] (nm^{-1}) para todas las fechas de muestreo desde el 2016 al 2023.	28
Capítulo 1. Tabla 3. Resultados del análisis de correlación y coeficiente de determinación (R^2). Coeficiente de correlación (r_P), número de datos (n), y r_{cri} . Cuando $r_P > r_{\text{cri}}$ el coeficiente de correlación es estadísticamente significativo.	29
Capítulo 1. Tabla 4. Concentración de clorofila <i>a</i> (Chl <i>a</i>) (mg m^{-3}), número de células de especie dominante ($\times 10^3 \text{ cells L}^{-1}$), y especie dominante (porcentaje total del número de células); coeficiente de absorción de luz del fitoplancton [$a_{\text{phy}}(440)$] (m^{-1}), materia orgánica disuelta cromofórica [CDOM; $a_{\text{CDOM}}(440)$] (m^{-1}), partículas no algales [$a_{\text{NAP}}(440)$] (m^{-1}); y pendientes espectrales del a_{phy} [S_{phy} (350–500)], a_{CDOM} [S_{CDOM} (350–500)] (nm^{-1}), y a_{CDOM} más a_{NAP} (350–500)] (nm^{-1}) de los eventos de florecimientos. El porcentaje de contribución de cada componente a la absorción de luz se muestra en los paréntesis. Las etiquetas de C1 a C8 fueron añadidas para identificar cada evento de florecimiento en el texto y figuras.	31
Capítulo 2. Tabla 1. Fechas de muestreo y código asociado a cada una de estas (Id) el cual será usado en las representaciones gráficas a lo largo del documento. Las fechas en negritas indican que un evento de florecimiento estuvo presente durante el muestreo (Chl <i>a</i> > 6 mg m^{-3}).	47
Capítulo 2. Tabla 2. Descripción de los sensores, bandas y ancho de bandas.	52

Capítulo 2. Tabla 3. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de las estimaciones de la concentración de Chla por los sensores OLCI y VIIRS y sus algoritmos (OC4, NN y OC3V). En negritas se indica cuál algoritmo presentó el mejor desempeño. **59**

Capítulo 2. Tabla 4. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de los tres sensores (OLCI-Sentinel3A, VIIRS-SNPP y VIIRS-JPSS1) para estimar la $R_{rs}(\lambda)$ medida *in situ*. **60**

Capítulo 2. Tabla 5. Resumen de los análisis estadísticos que comparan las $R_{rs_VIIRS-JPSS1}(\lambda)$ vs $R_{rs_VIIRS-SNPP}(\lambda)$ para las bandas centradas en el azul y verde. **61**

Capítulo 2. Tabla 6. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de cinco algoritmos (OC4, SNPP_OC3V, JPSS1_OC3V, AG y AGC) para estimar la concentración de Chla usando como entrada la $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$. En negritas se indica cuál algoritmo presentó el mejor desempeño. **62**

Índice de figuras

Introducción general. Figura 1. Espectros de absorción de luz típicos del fitoplancton (línea verde), CDOM (línea amarilla), NAP (línea café) y del agua pura (línea azul), en función de la longitud de onda (nm) en el ultravioleta (300 a 400 nm) y visible (400 a 700 nm). **17**

Capítulo 1. Figura. 1. Ubicación de las estaciones de muestreo al interior de la Bahía de Todos Santos (BTS) (B1–B10). Las estaciones B4–B10 fueron clasificadas como internas (profundidad < 30 m), mientras que las estaciones B1–B3 fueron clasificadas como externas. **27**

Capítulo 1. Figura. 2. Espectros de absorción de los coeficientes de absorción de luz del (a) fitoplancton $a_{phy}(\lambda)$, (b) materia orgánica disuelta cromofórica $a_{CDOM}(\lambda)$, (c) partículas no algales $a_{NAP}(\lambda)$, y sumatoria de $a_{CDOM}(\lambda)$ y $a_{NAP}(\lambda)$, en $a_{dg}(\lambda)$ para todos los muestreos. En cada inciso se muestran los histogramas de frecuencia de las respectivas pendientes espectrales (S) calculadas entre los 350 y 500 nm. **29**

Capítulo 1. Figura. 3. Anomalías estandarizadas de las concentraciones de Chla (ZChla). Los puntos rojos indican los eventos de florecimientos (ZChla > 1); los puntos negros indican los eventos contenidos en la línea base (93% de los datos). **30**

Capítulo 1. Figura. 4. (a) Diagrama de cajas y bigotes construido a partir de los datos contenidos en la línea base de los coeficientes de absorción de la materia orgánica disuelta cromofórica [CDOM; $a_{CDOM}(440)$ (m^{-1})], fitoplancton [$a_{phy}(440)$ (m^{-1})], partículas no algales [$a_{NAP}(440)$ (m^{-1})] y concentración de Chla ($mg\ m^{-3}$). Los puntos indican los valores extremos. Los bigotes muestran los valores máximos y mínimos, y las cajas indican los cuartiles (Q-25, mediana, y Q-75). (b) Diagrama ternario construido a partir de la línea base para los coeficientes de absorción $a_{phy}(440)$, $a_{CDOM}(440)$, and $a_{NAP}(440)$. Los puntos azules representan las estaciones externas y los puntos cafés representan las estaciones internas. **30**

Capítulo 1. Figura. 5. Diagrama de cajas y bigotes construido a partir de los datos contenidos en la línea base de (a) concentración de clorofila *a* (Chla) ($mg\ m^{-3}$) y coeficiente de absorción de luz del (b) fitoplancton [$a_{phy}(440)$ (m^{-1})], (c) materia orgánica disuelta cromofórica [CDOM; $a_{CDOM}(440)$ (m^{-1})], y (d) partículas no algales [$a_{NAP}(440)$ (m^{-1})]. Los puntos indican los valores extremos. Los bigotes muestran los valores máximos y mínimos, y las cajas indican los cuartiles (Q-25, mediana, y Q-75). **31**

Capítulo 1. Figura. 6. Espectros de absorción de luz de los coeficientes de (a) fitoplancton [$a_{phy}(\lambda)$ (m^{-1})], (b) materia orgánica disuelta cromofórica CDOM; $a_{CDOM}(\lambda)$ (m^{-1})], y sumatoria de (c) $a_{CDOM}(\lambda)$ y $a_{NAP}(\lambda)$ [$a_{dg}(\lambda)$] (m^{-1}) de los florecimientos. En cada figura, el espectro de línea base se muestra con línea punteada. **32**

Capítulo 1. Figura. 7. Valores de la pendiente espectral de $a_{phy}(\lambda)/a_{phy}(\max)$ a los 280, 330, y 370 nm para los florecimientos (C2–C8) y espectro línea base. $a_{phy}(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz del fitoplancton. **32**

Capítulo 1. Figura. 8. Valores del cálculo de la pendiente espectral en los intervalos de (a) 350–500 nm y (b) 370–412 nm para cada evento de florecimiento. Las líneas solidas son las medianas estadísticas calculadas a partir de los datos contenidos en la línea base. **33**

Capítulo 2. Figura 1. Bahía de Todos Santos, área de estudio y ubicación de las estaciones de muestreo. **45**

Capítulo 2. Figura 2. Fotografías de los sensores TriOS-RAMSES; radiómetro sumergido ajustado al sistema de flotación midiendo $L_u(\lambda)$ (a), radiómetro exterior midiendo $E_u(\lambda)$ (b). **46**

Capítulo 2. Figura 3. Diagrama de flujo ilustrando las diferentes etapas de análisis, desde la obtención de datos hasta la evaluación de los algoritmos para estimación de la concentración de Chla. **49**

Capítulo 2. Figura 4. Porcentaje, desviación estándar y coeficiente de variación del total de espectros de $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ contenidos en el set de datos (a). Los espectros $R_{rs_TriOS_n}(\lambda)$ fueron agrupados por análisis jerárquico en: (b) Cluster 1; (c) Cluster 2 y (d) Cluster 3. La curva en negritas del Cluster 3 corresponde al espectro D38, proveniente de la estación B2 (día 20 de abril del 2023). **56**

Capítulo 2. Figura 5. (a) Distribución del número de espectros de $R_{rs}(\lambda)$ por estación y por clúster; (b) Análisis de cajas y bigotes de la variabilidad de la concentración de *Chla* (mg m^{-3}) por clúster. Los bigotes muestran el valor máximo y mínimo, y las cajas muestran los cuartiles (Q-25, mediana, y Q-75). Los puntos representan los valores extremos. **58**

Lista de abreviaturas

Símbolo: Definición y unidades

BTS: Bahía de Todos Santos

SCC: Sistema de la Corriente de California

DB1: Base de datos 1

DB2: Base de datos 2

HPLC: Cromatografía Líquida de Alta Resolución

Chla: concentración clorofila *a*, mg m^{-3}

Z*Chla*: clorofila *a* estandarizada

FAN: Florecimientos algales nocivos

MAA: Aminoácidos tipo micosporina

$R_{rs}(\lambda)$: reflectancia medida por el sensor remoto, sr^{-1}

$L_u(\lambda)$: radiancia subsuperficial emergente, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$

$L_w(\lambda)$: radiancia superficial emergente, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$

$E_d(\lambda)$: irradiancia incidente, $\text{W m}^{-2} \text{nm}^{-1}$

CDOM: materia orgánica disuelta cromofórica

NAP: partículas no algales

$a(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz, m^{-1}

$a_w(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz por el agua de mar, m^{-1}

$a_{CDOM}(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz por la materia orgánica disuelta cromofórica, m^{-1}

$a_{phy}(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz por el fitoplancton, m^{-1}

$a_{NAP}(\lambda)$: coeficiente de absorción de luz por las partículas no algales, m^{-1}

$a_{dg}(\lambda)$: suma de los coeficientes de absorción de luz por la materia orgánica disuelta cromofórica y las partículas no algales, m^{-1}

$b_b(\lambda)$: coeficiente de retrodispersión de luz, m^{-1}

POI: Propiedades Ópticas Inherentes

POA: Propiedades Ópticas Aparentes

$S_{phy}(\lambda)$: pendiente espectral del fitoplancton, nm^{-1}

$S_{CDOM}(\lambda)$: pendiente espectral de la materia orgánica disuelta cromofórica, nm^{-1}

$S_{\text{NAP}}(\lambda)$: pendiente espectral de las partículas no algales, nm^{-1}
 $S_{\text{dg}}(\lambda)$: pendiente espectral de la suma de los coeficientes de absorción de luz por la materia orgánica disuelta cromofórica y las partículas no algales, nm^{-1}
OLCI: Ocean Land Color Instrument
VIIRS: Visible Infrared Imaging Radiometer Suite
OCI: Ocean Color Instrument
SNPP: Suomi National Polar-orbiting Partnership
JPSS: Joint Polar Satellite System
MODIS: Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer
PACE: Plankton, Aerosol, Cloud and ocean Ecosystem
NASA: National Aeronautics and Space Administration
NOAA: National Oceanic and Atmospheric Administration
ESA: Agencia Espacial Europea

Lista de ecuaciones

Introducción general. Ecuación 1. Cálculo del coeficiente de absorción de luz	16
Introducción general. Ecuación 2. Cálculo de la reflectancia marina	18
Introducción general. Ecuación 3. Cálculo de la reflectancia medida por el sensor remoto	18
Introducción general. Ecuación 4. Forma general del algoritmo empírico que estima la concentración de Chla.....	21
Capítulo 1. Ecuación 1: Cálculo del coeficiente de absorción por el material particulado	27
Capítulo 1. Ecuación 2: Cálculo del coeficiente de absorción por la materia orgánica disuelta cromofórica.....	27
Capítulo 1. Ecuación 3: Cálculo de la pendiente espectral de la materia orgánica disuelta cromofórica.....	28
Capítulo 1. Ecuación 4: Cálculo de la pendiente espectral del fitoplancton.....	28
Capítulo 1. Ecuación 5: Cálculo de las anomalías estandarizadas.....	28
Capítulo 1. Ecuación 6: Cálculo de la abundancia celular.....	28
Capítulo 2. Ecuación 1: Cálculo de la reflectancia medida por el sensor remoto	41
Capítulo 2. Ecuación 2: Cálculo de la conversión de $L_u(\lambda)$ a $L_w(\lambda)$	49
Capítulo 2. Ecuación 3: Cálculo de la estandarización de las curvas de reflectancia ...	50
Capítulo 2. Ecuación 4: Cálculo del coeficiente de correlación	50
Capítulo 2. Ecuación 5: Cálculo de la covarianza	50
Capítulo 2. Ecuación 6: Cálculo del error absoluto medio (MAE)	53
Capítulo 2. Ecuación 7: Cálculo del sesgo (BIAS).....	53
Capítulo 2. Ecuación 8: Algoritmo OC4.....	54

Capítulo 2. Ecuación 9: Algoritmo OC3V con parámetros utilizados por el VIIRS a bordo del SNPP.....	54
Capítulo 2. Ecuación 10: Algoritmo OC3V con parámetros utilizados por el VIIRS a bordo del JPSS1	55
Capítulo 2. Ecuación 11: Algoritmo regional de cuarto orden propuesto por Alvarado-Graef et al. (2024)	55
Capítulo 2. Ecuación 12: Algoritmo regional de segundo orden propuesto por Alvarado-Graef et al. (2024)	55

1. Introducción General

El fitoplancton, base de la cadena trófica marina, depende de la luz para realizar la fotosíntesis, proceso que contribuye significativamente al flujo global del carbono, elemento clave para la vida en nuestro planeta (Calbet y Landry, 2004). La cantidad y calidad de luz que penetra en la columna de agua están determinadas por la absorción y dispersión de la luz por parte del fitoplancton, pero a su vez también por partículas no algales (NAP por sus siglas en inglés) y por la materia orgánica disuelta cromofórica (CDOM, por sus siglas en inglés) (IOCCG, 2006). En particular, para el proceso de la fotosíntesis, el fitoplancton absorbe energía de la *Radiación Fotosintéticamente Activa* (PAR por sus siglas en inglés), que es aquella que se distribuye entre los 400 y 700 nm de longitud de onda del espectro electromagnético (Kirk, 2011).

Para poder describir y explicar estos procesos de interacción, las propiedades ópticas del agua se clasifican en propiedades ópticas inherentes (POI) y aparentes (POA) (Kirk, 2011). Las POI se definen como aquellas que dependen exclusivamente de las características intrínsecas del agua y sus componentes, y no varían con las condiciones de iluminación. Las principales POI son: el coeficiente de absorción (a), el cual mide la cantidad de luz que es absorbida por el agua y sus constituyentes (fitoplancton, NAP y CDOM) y el coeficiente de dispersión (b).

El coeficiente de absorción varía con la longitud de onda (λ) y se puede describir matemáticamente como (IOCCG, 2006; Kirk, 2011):

$$a(\lambda) = a_{phy}(\lambda) + a_{CDOM}(\lambda) + a_{NAP}(\lambda) + a_W(\lambda) \quad (1)$$

donde $a_{\text{phy}}(\lambda)$ es el coeficiente de absorción de luz por el fitoplancton, $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ es el coeficiente de absorción de luz por la materia orgánica cromofórica, $a_{\text{NAP}}(\lambda)$ es el coeficiente de absorción de luz por las partículas no algales y $a_w(\lambda)$ es el coeficiente de absorción de luz por el agua de mar. Cada uno de estos componentes tiene una forma espectral típica (Fig. 1), la cual muestra que el fitoplancton presenta dos máximos de absorción centrados a los 440 y 675 nm, determinados principalmente por los cambios en la concentración de clorofila *a* (Chl*a*). Sin embargo, se puede observar otro máximo en la región ultravioleta (300 a 400 nm) del espectro electromagnético asociado a compuestos orgánicos adheridos a las células (Bricaud et al., 2010). Por otro lado, el CDOM y NAP aumentan su capacidad de absorción de forma exponencial hacia las longitudes de onda del azul y ultravioleta (300 a 400 nm). Finalmente, $a_w(\lambda)$ aumenta hacia el rojo (e infrarrojo) del espectro electromagnético y es considerado como constante (Kirk, 2011).

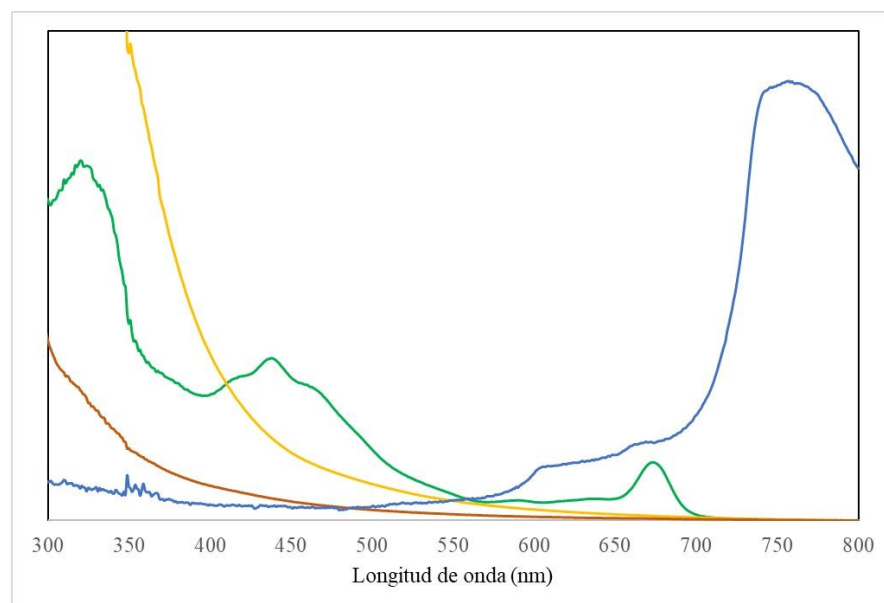


Figura 1. Espectros de absorción de luz típicos del fitoplancton (línea verde), CDOM (línea amarilla), NAP (línea café) y del agua pura (línea azul), en función de la longitud de onda (nm) en el ultravioleta (300 a 400 nm) y visible (400 a 700 nm).

Por otro lado, las POA son aquellas propiedades que, además de depender de los componentes del agua, dependen de la distribución angular y espectral de la luz solar incidente, lo que implica que varían según las condiciones de iluminación tales como la posición del sol, nubosidad, o estado de la superficie del mar (Kirk, 2011). Una de estas propiedades es la reflectancia marina ($R(\lambda)$), la cual se define como:

$$R(\lambda) = \frac{E_u(\lambda)}{E_d(\lambda)} \quad (2)$$

donde $E_u(\lambda)$ es la irradiancia emergente del agua y $E_d(\lambda)$ es la irradiancia incidente en la superficie del mar.

En el contexto de la percepción remota, se define a la reflectancia del sensor remoto ($R_{rs}(\lambda)$), con base en la siguiente ecuación (IOCCG, 2006):

$$R_{rs}(\lambda) = \frac{L_w(\lambda)}{E_d(\lambda)} \quad (3)$$

donde $L_w(\lambda)$ es la radiancia superficial emergente del agua y se define como un flujo de luz que es detectado por el sensor y pasa por un ángulo sólido (con unidades sr^{-1}).

Los cambios en la magnitud de $R_{rs}(\lambda)$ a través del espectro electromagnético, y en especial en el intervalo del visible, dependen de los componentes del agua que, a su vez, genera variaciones en el color de la superficie de los océanos (IOCCG, 2006).

La información generada por sensores remotos a bordo de satélites se ha establecido como una herramienta fundamental para estudiar, clasificar y monitorear a los océanos (IOCCG, 2000; McCarthy et al., 2017), ya que permite una cobertura sinóptica y

continua de grandes extensiones oceánicas y costeras. Actualmente, orbitan en el espacio diversos sensores destinados a medir la $R_{rs}(\lambda)$ (Tabla 1). Entre estos, están los sensores “Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer” (MODIS), a bordo de los satélites Terra y Aqua (<https://modis.gsfc.nasa.gov/about/specifications.php>) los cuales, a pesar de tener un largo historial de datos (en órbita desde 1999) y amplia validación en zonas oceánicas, son sensores cuya vida útil está finalizando (Barnes et al., 2019). Los sensores “Visible Infrared Imaging Radiometer Suite” (VIIRS) fueron diseñados para ocupar el lugar de los MODIS, y desde su lanzamiento han generado información variada sobre los ecosistemas marinos (Kahru et al., 2014; Tilstone et al., 2021; entre otros), con la ventaja de una mejor resolución espacial en comparación a los MODIS (750 m) y un mejor desempeño en aguas costeras (Hlaing et al., 2013). Esto llevó a que estos fueran lanzados en tres diferentes satélites (SNPP, JPSS1 y JPSS2). Asimismo, la Agencia Espacial Europea (ESA) desarrolló los sensores “Ocean and Land Color Instrument” (OLCI), los cuales se enviaron al espacio en los satélites Sentinel 3A y 3B; este último lanzado en el 2022. Finalmente, en el 2024, la NASA lanzó al espacio el satélite PACE (Plankton, Aerosol, Cloud, and ocean Ecosystem), en el cual el sensor (Ocean Color Instrument, OCI) realiza mediciones de la $R_{rs}(\lambda)$ entre los 315 a 894 nm a una resolución de 2.5 nm, cuyos datos aún se encuentran en etapa diagnóstico.

Tabla 1. Características generales de los satélites y sensores de color del océano activos actualmente. Información tomada de <https://oceancolor.gsfc.nasa.gov/> y <https://sentinels.copernicus.eu/web/sentinel/copernicus/sentinel-3>.

Satélite/Agencia	Sensor	Año de lanzamiento	Resolución temporal	Resolución espacial	Resolución espectral
Terra (NASA)	MODIS	1999	Diaria	1 km	10 bandas
Aqua (NASA)	MODIS	2002	Diaria	1 km	10 bandas
SNPP (NOAA)	VIIRS	2011	Diaria	750 m	6 bandas
JPSS1 (NASA)	VIIRS	2017	Diaria	750 m	6 bandas
JPSS2 (NASA)	VIIRS	2022	Diaria	750 m	6 bandas
Sentinel 3A (ESA)	OLCI	2016	2 a 10 días	300 m a 1 km	11 bandas
Sentinel 3B (ESA)	OLCI	2018	2 a 10 días	300 m a 1 km	11 bandas
PACE (NASA)	OCI	2024	Diaria	1 km	Hiperespectral (2.5 nm)

Es importante mencionar que cada sensor presenta diferentes características de resolución espectral y espacial (Tabla 1), lo que conlleva ventajas y desventajas, las cuales deben de ser consideradas dependiendo de la aplicación o del fenómeno oceanográfico que se vaya a estudiar. Además, han sido diseñados para detectar la $R_{rs}(\lambda)$ en diferentes intervalos de longitudes de onda del espectro electromagnético, denominadas bandas espectrales. Históricamente, estas bandas se han centrado en el intervalo del visible, con énfasis en las regiones azul (412-490 nm) y verde (510-560 nm) (Werdell et al., 2023), las cuales coinciden con la máxima y mínima absorción de luz por la *Chla* (ver Fig. 1).

Para poder relacionar la información generada por los sensores remotos con la *Chla*, es necesario considerar que existen diferentes condiciones ópticas en el océano, las cuales modifican la relación entre la $R_{rs}(\lambda)$ y la *Chla*. En aguas oceánicas claras, clasificadas como Aguas Caso 1 (Morel y Prieur, 1973), el fitoplancton es el principal componente que define los cambios en el color del mar y en la $R_{rs}(\lambda)$. Tomando esto en consideración, se han definido relaciones empíricas entre la $R_{rs}(\lambda)$ y la concentración de *Chla* las cuales se basan en una razón entre la respuesta de las bandas

azul y verde (Razón Blue:Green, Máxima Razón de Bandas o MBR por sus siglas en inglés) de los sensores remotos satelitales (IOCCG, 2000; Werdell et al., 2023). La forma general de estos algoritmos es (Werdell et al., 2023):

$$\log_{10}(Chla) = a_0 + \sum_{i=1}^4 a_i (\log_{10}(\frac{R_{rs}(\lambda_{blue})}{R_{rs}(\lambda_{green})}))^i \quad (4)$$

donde $R_{rs}(\lambda_{blue})/R_{rs}(\lambda_{green})$ es la razón, y a_0 - a_4 son los coeficientes de un polinomio. Tanto las bandas como los coeficientes varían con el sensor remoto. El polinomio y sus coeficientes se definen a partir de datos de Chla y de $R_{rs}(\lambda)$ medidas *in situ*. Los algoritmos que se aplican globalmente, y que son parte del procesamiento estándar de los sensores, han utilizado bases de datos *in situ* de diferentes cuencas oceánicas para establecer el polinomio, mayormente de aguas oceánicas claras. El número de bandas usadas para determinar el MBR con el que se alimenta a los algoritmos actuales varían entre tres (cuando el algoritmo se denomina OC3) a cuatro (OC4), lo que permite ajustarlo a las características específicas de cada sensor y/o cuerpo de agua.

Sin embargo, en cuerpos de agua costeros, las NAP y el CDOM también van a contribuir a los cambios en $R_{rs}(\lambda)$, por lo que se definen como cuerpos de agua ópticamente complejos o Aguas Caso 2 (IOCCG, 2000). En este tipo de agua, las variaciones en la $R_{rs}(\lambda)$ en el azul no solo dependen del fitoplancton (o la Chla), sino también de estos otros componentes. Esto lleva a que los errores en la estimación de la Chla usando estos algoritmos globales puedan sobrepasar más del 100% en zonas costeras (Giannini et al., 2021; Zhou et al., 2023), en comparación al 30% que se observa como máximo en zonas oceánicas (IOCCG, 2000; Antoine, 2010).

En particular en la región costera del Pacífico Nororiental, son pocos los trabajos

que han evaluado el porcentaje de incertidumbre asociado a las estimaciones de Chl_a a partir de los sensores VIIRS y OLCI (Kahru et al., 2014; Giannini et al., 2021; Vishnu y Costa, 2023; Alvarado-Graef et al., 2024). Sin embargo, estos coinciden que para zonas costeras y/o con altas concentraciones de Chl_a los errores se incrementan. Para minimizar estos errores se ha recomendado que se estudien las propiedades ópticas a nivel regional, para poder evaluar e implementar formas de disminuir las incertidumbres (Favareto et al., 2018; Hieronymi, 2019; Casey et al., 2020). En particular, en las costas de la península de Baja California, Alvarado-Graef et al., (2024) propusieron un algoritmo regional basado en las MBR, el cual fue alimentado con datos *in situ* provenientes de esta región, que ayudó a reducir el error en la estimación de la Chl_a . Sin embargo, no hay ningún trabajo de esta naturaleza enfocado en la Bahía de Todos Santos (Baja California), región de gran importancia económica a nivel nacional e internacional, que deriva en gran parte de las actividades pesqueras y acuícolas (Tanahara et al., 2021).

En este contexto, el objetivo general de esta tesis es caracterizar las propiedades ópticas y evaluar la estimación de la concentración de Chl_a derivada de dos algoritmos empíricos globales y dos algoritmos regionales, tomando como base datos derivados de los sensores VIIRS (SNPP y JPSS1) y OLCI (Sentinel 3A).

Tomando esto en consideración, esta tesis está estructurada en dos capítulos, los cuales atienden a dos objetivos específicos cada uno. El primer capítulo se enfoca en describir y caracterizar las propiedades ópticas promedio (o línea base) de la Bahía de Todos Santos, así como las propiedades ópticas de florecimientos fitoplanctónicos como herramienta para su detección utilizando sensores remotos del color del océano. El segundo capítulo compara y evalúa el desempeño de los productos de $R_{rs}(\lambda)$ y Chl_a , así

como de los algoritmos empíricos globales del color del océano utilizados por los sensores OLCI y VIIRS, considerando las características ópticas de la bahía. En este segundo capítulo también se evaluó el desempeño de dos algoritmos regionales propuestos por Alvarado-Graef et al. (2024). Los resultados de este estudio contribuyen a mejorar la comprensión y el uso de los datos satelitales en sistemas costeros.

2. Objetivo general

Caracterizar las propiedades ópticas de la Bahía de Todos Santos (Baja California, México) con la finalidad de evaluar su aplicación en la percepción remota del color del océano mediante la integración de datos radiométricos obtenidos *in situ* y por sensores satelitales.

3. Objetivos Específicos

- Describir la variabilidad promedio o línea base de las propiedades ópticas en la Bahía de Todos Santos utilizando una base de datos que abarca del 2016 al 2023.
- Describir las propiedades ópticas de florecimientos fitoplanctónicos como herramienta para su detección utilizando sensores remotos del color del océano.
- Comparar los productos satelitales derivados de los sensores OLCI a bordo del Sentinel-3A, y VIIRS a bordo del SNPP y JPSS1 contra información medida *in situ*.
- Evaluar el desempeño de dos algoritmos globales (OC3V y OC4) y dos algoritmos regionales (AG y AGC) utilizando las reflectancias medidas *in situ* como entrada a los algoritmos.

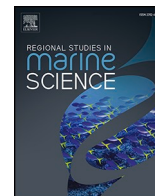
4. **Capítulo 1.** Propiedades de absorción de luz de los florecimientos de dinoflagelados en la Bahía de Todos Santos, México (Océano Pacífico Nororiental).

Larios-Muñiz, M., Gonzalez-Silvera, A., Santamaria-del-Ángel, E., Guzman-Hernandez, M. E., Betancur-Turizo, S., Torres-Beltrán, M., and López-Calderón, J. (2024). Light absorption properties of dinoflagellate blooms in Todos Santos Bay, Mexico (northeast Pacific Ocean). *Regional Studies in Marine Science*, 72, 103438. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2024.103438>

4.1 Resumen

La Bahía de Todos Santos (BTS) se encuentra localizada en la costa noreste de la península de Baja California, México. Los florecimientos algales dominados por dinoflagelados en la BTS son cada vez más recurrentes e impactan negativamente el ecosistema y la economía de la región. En este estudio, analizamos la concentración de clorofila *a* (Chl*a*) y los coeficientes de absorción de luz del fitoplancton, la materia orgánica disuelta cromofórica (CDOM) y las partículas no algales entre los 250 y 700 nm con datos recopilados entre 2016 y 2023. Se calcularon las pendientes espectrales (S_{phy} , S_{CDOM} y S_{dg}) utilizando el intervalo de longitudes de onda de 370 a 412 nm. El objetivo de este trabajo fue definir una línea base, identificar las propiedades de absorción de luz relacionadas con los florecimientos algales y compararlos con la línea base. Se identificaron ocho eventos de florecimientos con concentraciones de Chl*a* que oscilaron entre 7.7 y 36.2 mg m⁻³. *Lingulodinium Polyedra* fue dominante en cuatro eventos, mientras que *Prorocentrum micans* fue dominante en dos. Una mezcla de dinoflagelados caracterizó a los otros dos eventos de florecimientos. Se observaron cambios significativos en magnitud y forma de la pendiente de los espectros de absorción de los florecimientos lo cual se relacionó a las micosporinas. Sin embargo, estos cambios variaron dependiendo de la especie dominante y de la concentración de Chl*a*. Finalmente, S_{phy} fue superior a S_{CDOM} o S_{dg} para la identificación de los florecimientos y puede ser potencialmente utilizado para su detección remota utilizando la nueva generación de satélites que realizan mediciones en la banda del ultravioleta.

Palabras clave: Florecimientos de dinoflagelados; coeficientes de absorción de luz; pendientes espectrales; aminoácidos micosporinas; Océano Pacífico Nororiental



Light absorption properties of dinoflagellate blooms in Todos Santos Bay, Mexico (northeast Pacific Ocean)

Mariana Larios-Muñiz^a, Adriana Gonzalez-Silvera^{a,*}, Eduardo Santamaria-del-Ángel^b,
María Ester Guzman-Hernandez^a, Stella Betancur-Turizo^c, Mónica Torres-Beltrán^a,
Jorge López-Calderón^a

^a Universidad Autónoma de Baja California, Facultad de Ciencias Marinas, Carretera Transpeninsular Ensenada - Tijuana No 3917, Playitas, Ensenada, BC 22860, Mexico

^b Subdirección del Sistema de Información y Análisis Marino Costero (SIMAR), Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad (CONABIO), Liga Periférico-Insurgentes Sur 4903, Parques del Pedregal, 14010, Tlalpan, Ciudad de México, Mexico

^c Centro de Investigaciones Oceanográficas e Hidrográficas del Caribe (CIOH), Tv. 52 #16- a #16220, Isla Manzanillo, Cartagena, Colombia

ARTICLE INFO

Keywords:

Dinoflagellate bloom
Light absorption coefficient
Spectral slope
Mycosporine-like amino acid
Northeast Pacific Ocean

ABSTRACT

Todos Santos Bay (TSB) is located on the northeastern coast of the Baja California peninsula in Mexico. Algal blooms dominated by dinoflagellates in TSB are recurrent and negatively impact the ecosystem of the bay and regional economy. In this study, we analyzed the concentration of chlorophyll a (Chla) and the light absorption coefficients of phytoplankton, colored dissolved organic matter (CDOM), and non-algal particles between 250 and 700 nm with data collected between 2016 and 2023. We calculated the respective spectral slopes of the absorption coefficients (S_{phy} , S_{CDOM} , and S_{dg}) using the wavelength range of 370–412 nm. We aimed to define a baseline, identify the light absorption properties associated with blooms, and compare these to the baseline. Eight bloom events were identified, with Chla concentrations ranging between 7.7 and 36.2 mg m⁻³. *Lingulodinium polyedra* was dominant in four, while *Prorocentrum micans* was dominant in two. A mixture of dinoflagellates characterized the other two blooms. Significant changes in the magnitude, shape, and slopes of the spectra due to mycosporine-like amino acids were observed during blooms. However, these changes varied based on the dominant species and Chla concentration. Finally, S_{phy} was superior to either S_{CDOM} or S_{dg} when identifying blooms and could potentially be employed for their detection using the new generation of satellites capable of gathering UV-band data.

1. Introduction

Multispectral optical remote sensing has been used for decades to monitor and manage ocean ecosystems. Long-term satellite imaging has provided a global view of our planet, allowing scientists to assess ecosystem dynamics, biodiversity, natural hazards, and many other factors and processes (McClain, 2009; Groom et al. 2019). Satellite imaging provides information with high temporal and spatial resolution, making it essential when monitoring and characterizing marine ecosystems (Wilson et al. 2009). In particular, satellite images of ocean color can be used to

measure phytoplankton biomass based on concentrations of chlorophyll-a (Chla; O'Reilly and Werdell, 2019), an indicator pigment of phytoplankton biomass (Jeffrey et al. 1997) and a key indicator used to characterize ocean habitats (Gonzalez-Silvera et al., 2006; Krug et al. 2018; van Oostende et al. 2023). Due to the characteristics of water and its components (e.g., non-algal particles and dissolved matter), the inherent optical properties of water, light absorption, and backscattering are related to water quality and changes in the phytoplankton community. Thus, ocean color can be used to monitor harmful algal blooms (HABs; Blondeau-Patissier et al., 2014; IOCCG, 2021).

Abbreviations: $a_{phy}(440)$, absorption coefficient of phytoplankton; $a_{CDOM}(440)$, absorption coefficient of CDOM; $a_{NAP}(440)$, absorption coefficient of non-algal particles; CCS, California Current System; Chla, chlorophyll; CDOM, colored dissolved organic matter; HAB, harmful algal bloom; HPLC, high-performance liquid chromatography; S_{phy} , spectral slope of a_{phy} ; S_{CDOM} , spectral slope of a_{CDOM} ; S_{NAP} , spectral slope of a_{NAP} ; S_{dg} , spectral slope of a_{CDOM} and a_{NAP} combined; TSB, Todos Santos Bay.

* Corresponding author.

E-mail address: adriana.gonzalez@uabc.edu.mx (A. Gonzalez-Silvera).

<https://doi.org/10.1016/j.rsma.2024.103438>

Received 17 October 2023; Received in revised form 7 February 2024; Accepted 12 February 2024

Available online 17 February 2024

2352-4855/© 2024 Elsevier B.V. All rights reserved.

The definition of an algal bloom is arbitrary, as it depends on the aspects selected for its characterization, including increases in Chl a concentrations or the rate of cell growth. In addition, what may be considered a notable increase in the Chl a concentration depends on the baseline characteristics of the region under study. For this reason, Blondeau-Patissier et al. (2014) recommend that when using remote detection methods to evaluate algal blooms, several algal bloom proxies, such as the Chl a concentration or marine reflectance, should be compared to those of the waters unaffected by the bloom.

Aguilar-Maldonado et al. (2019) state that baseline property values that define a given water body are needed to determine if any significant anomalies associated with a bloom are present. These authors proposed the use of the Chl a concentration, light absorption by phytoplankton [$a_{\text{phy}}(\lambda)$], and light absorption by colored dissolved organic matter [CDOM; $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$] for this purpose. Notably, $a_{\text{phy}}(\lambda)$ can reflect changes in phytoplankton biomass and taxonomic composition (at times), while $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ can be related to bloom degradation, the products released by phytoplankton, bacterial activity, and continental contributions (Nelson et al., 2002). In addition to detecting increases in algal biomass (or Chl a), it is also important to detect changes in the functional types present among the blooming phytoplankton (IOCCG, 2021), as the species behind a bloom influence how the ecosystem will be affected (Hallegraeff et al., 2021).

The coasts of California (USA) and Baja California (Mexico) are frequently affected by blooms of the toxin-producing dinoflagellate *Lingulodinium polyedra* (Kahru and Mitchell, 1998; Gutierrez-Mejia et al. 2016; Ramírez-Altamirano et al., 2023; Zheng et al. 2023), with the associated Chl a concentrations reaching up to 897 mg m $^{-3}$ (Zheng et al. 2023). Recently, Kahru et al. (2021) demonstrated the potential of using a UV-to-blue reflectance ratio ($R_{rs,380}:R_{rs,443}$) to detect harmful algal blooms (HABs) of this dinoflagellate along the California coast. Based on the previous observations of Kahru and Mitchell (1998), Kahru et al. (2021) indicated that blooms of this species are associated with the production of mycosporine-like amino acids (MAAs) and increases in $a_{\text{phy}}(\lambda)$ and $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ at 380 nm. However, Kahru et al. (2021) conducted their study with data from only two blooms (March 1995 and April-May 2020). Thus, it is necessary to confirm if their observations can be applied to any *L. polyedra* bloom and those of other dinoflagellates, as MAA production is not exclusive to this species (Weiss et al. 2022).

Located in the Pacific Ocean of northern Mexico, Todos Santos Bay (TSB) is known for its fishing and aquaculture production, with its mariculture activities being among the most important and representative of the Baja California peninsula (Tanahara et al. 2021). The success of these activities is due to the location of the bay, as its productivity is largely due to the influence of the California Current and California Countercurrent, which bring nutrient-rich waters into the bay (Espinosa-Carreón et al., 2001; García-Mendoza et al. 2009). The bay is also subject to frequent urban and industrial discharge, with occasional fluvial inputs that occur primarily during the rainy season (Tanahara et al. 2021). These factors have increased the frequency of algal blooms, which are mainly dominated by dinoflagellates (Peña-Manjarrez et al. 2001; Medina-Elizalde et al. 2016), affecting the light absorption properties of phytoplankton and CDOM in the bay (Aguilar-Maldonado et al. 2018).

Given the importance of TSB, a baseline must be established to distinguish between the light absorption properties associated with bloom and non-bloom conditions. To this end, this study evaluated the Chl a concentration and light absorption by particulate and dissolved material in the bay between 2016 and 2023, when several dominant dinoflagellate-driven blooms developed. This study defines key characteristics for optimizing algorithms to improve bloom detection using remote sensors.

2. Materials and methods

2.1. Study area

Todos Santos Bay is located on the northwestern coast of Baja California (31° 40' to 31° 56' N and 116° 36' to 116° 50' W), approximately 100 km south of the Mexico-United States border (Kurczyn et al. 2019). The area of this semi-enclosed bay is ~260 km 2 (Fig. 1). The bathymetry of the bay generally exhibits a gentle slope, with depths of up to 50 m; however, an underwater canyon of more than 400 m depth is present in the southern area of the bay (Tanahara et al. 2021). The physical, chemical, and biological characteristics of the bay are closely related to the California Current System (CCS), which transports subarctic water characterized by low temperatures, low salinity, and high dissolved oxygen concentrations, toward the equator (Durazo et al. 2017). The seasonality of the CCS can be divided into a cold season with precipitation from November to April (Tanahara et al. 2021) and a warm season with intensified winds and coastal upwelling from May to October (Delgadillo-Hinojosa et al. 2020). The bay has also been divided into internal and external zones (Delgadillo-Hinojosa et al. 2015, 2020; Ramírez-Altamirano et al. 2023), with the former being the most affected by wind-driven circulation and coastal morphology and the latter being most affected by oceanic dynamics, seasonality, and coastal upwelling (Delgadillo-Hinojosa et al. 2015, 2020; Flores-Vidal et al. 2018). However, it is necessary to determine if these zonal characteristics are also observed in other optical or biological variables.

2.2. Field sampling

This study analyzed two databases: DB1 and DB2. The first, DB1, contained data collected from six stations (B1–B6) between October 2016 and June 2019 (Fig. 1). The second, DB2, contained data that were collected periodically from stations B2, B4, and B6 between 2020 and 2023 (Fig. 1). Stations within the bay were classified as either internal (depth < 30 m; B4–B10) or external (depth > 30 m; B1–B3), based on the previous zonation of the bay (Delgadillo-Hinojosa et al. 2015, 2020). When algal blooms were developing within TSB that modified the color of the water (i.e., a red tide was evident), sampling was also conducted in stations B7, B8, B9, and B10 (Fig. 1). The sampling dates appear in Table 1. Almost all sampling days were clear with low cloud cover.

At each station, surface-water samples were collected using a bucket or a Go-Flo sampling bottle (General Oceanics Inc., Miami, FL, USA) to determine the Chl a concentration, light absorption coefficient of phytoplankton [$a_{\text{phy}}(\lambda)$], and non-algal particulate material [$a_{\text{NAP}}(\lambda)$]. The $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ samples were taken directly from the Go-Flo bottle or sea using nitrile gloves to avoid contamination and, after triplicate rinses, they were stored in previously washed and sterilized amber glass bottles, according to the protocol described by Mitchell et al. (2003). The samples were kept refrigerated until measurements were done; it was the day after sampling, occasionally some days after that, but no longer than one week. Recently, it has been recommended (Mannino et al. 2019) that samples should be filtered right after their collection considering that filtration delays are not well documented, but may be significant.

Between 500 and 2000 mL of the remaining water was passed through a positive filtration system using 25-mm Whatman GF/F glass fiber filters (Whatman International Ltd., Little Chalfont, United Kingdom) to determine the Chl a concentration and particulate matter absorption coefficient. The filters were immediately stored in a deep freezer (–80 °C) until analysis.

2.3. Absorption coefficients

The $a_{\text{P}}(\lambda)$, $a_{\text{NAP}}(\lambda)$, and $a_{\text{phy}}(\lambda)$ were determined according to the methodology described by Mitchell et al. (2003) using the filter-pad technique in transmittance configuration with an integrating sphere with externally mounted samples. More about this configuration can be

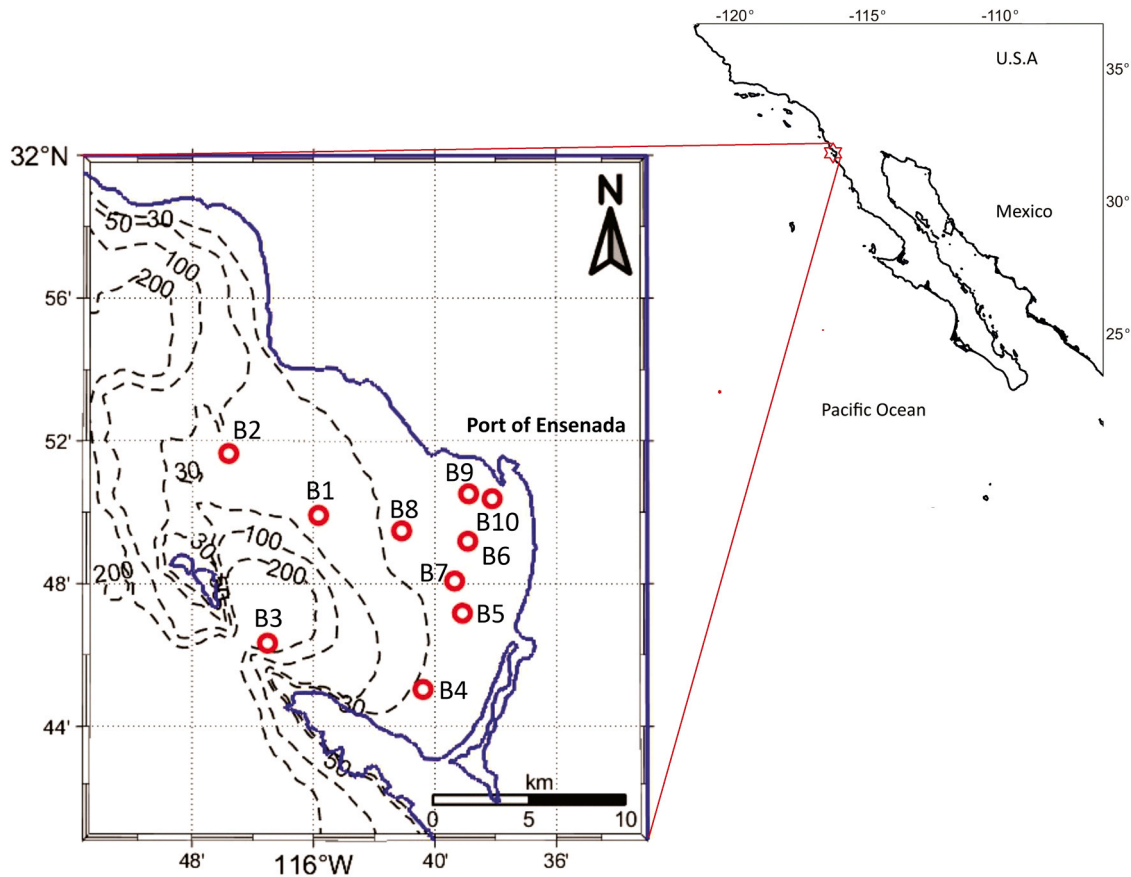


Fig. 1. Todos Santos Bay (TSB) study area and locations of the sampling stations (B1–B10). Stations B4–B10 were classified as internal (< 30 m depth), while stations B1–B3 were classified as external.

Table 1

Sampling dates. Dates in bold indicate that a phytoplankton bloom was present during sampling. The absorption coefficients for particulate matter in DB1 only include the visible part of the electromagnetic spectrum (400–700 nm), while those for DB2 include the ultraviolet portion of the spectrum (250–400 nm).

DB1		DB2		
13 October 2016	12 June 2018	2 October 2020	28 June 2021	3 December 2021
6 February 2017	28 August 2018	5 November 2020	5 August 2021	12 December 2021
14 March 2017	18 October 2018	23 February 2021	9 September 2021	19 December 2021
30 May 2017	4 April 2019	3 March 2021	1 October 2021	20 January 2022
3 November 2017	8 June 2019	29 April 2021	28 October 2021	23 March 2022
2 February 2018		3 June 2021	12 November 2021	24 June 2022
				20 April 2023

found in Roesler et al. (2018). The sample filters were analyzed in a Cary 100 UV-Vis spectrophotometer (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA) to read the optical density of the particulate material (OD_f) between 250 and 800 nm (resolution of 1 nm). Two blank GF/F filters from the same package of filters used for samples were soaked in ~25 mL 0.2 μm filtered seawater during 24 hs previous to the analysis and their optical density (OD_b) was read as with samples. Subsequently, the filters (including blanks) were returned to a filtration system, and hot methanol was added. The filters were allowed to rest twice for 15 minutes to eliminate any pigmented material (Kishino et al. 1985). After removing

the pigmented material, the filters were analyzed once again in the spectrophotometer to obtain the OD_f of the non-algal material. For all samples, the $a_p(\lambda)$ and $a_{NAP}(\lambda)$ were determined with Eq. (1):

$$a(\lambda) = (2.3 \frac{S}{V}) (0.392((OD_f - OD_b) - OD_{null}) + 0.655((OD_f - OD_b) - OD_{null})^2) \tag{1}$$

where OD_f is the optical density of the filter with material (before and after methanol extraction), OD_b is the average optical density of the two blank filters (before and after methanol extraction), OD_{null} is the correction for residual shifts in the filter (an average between 790–800 nm was used), S is the effective filtration area, and V is the filtered volume. The $a_{phy}(\lambda)$ was determined as the difference between $a_p(\lambda)$ and $a_{NAP}(\lambda)$.

Water samples collected for $a_{CDOM}(\lambda)$ measurements were filtered using a negative filtration system with Nuclepore filters (Whatman International Ltd.; 0.2- μm pore opening, 25-mm diameter). The filtration system was also previously washed using 10% HCl and several rinses with Milli-Q water) to prevent contamination by organic or colored material. The resulting filtrate was placed in a 10-cm long cuvette which was maintained stored with Milli-Q water previous to the analysis, and its optical density was measured between 250 and 800 nm (resolution of 1 nm) in the spectrophotometer. A blank was prepared using Milli-Q water. Subsequently, the CDOM light absorption coefficient was determined with Eq. (2) from (Mitchell et al. 2003):

$$a_{CDOM}(\lambda) = \left(\frac{2.303}{L} \right) ((OD_s(\lambda) - OD_{null}) - (OD_b(\lambda) - OD_{null})) \tag{2}$$

where L is the cell path length (10 cm), OD_s is the optical density of the

sample, OD_b is the optical density of the blank, and OD_{null} is the optical density of the null point (~ 550 nm).

2.4. Spectral slope determination

The spectral slope of the CDOM (S_{CDOM}) is defined as a quasi-constant parameter in algorithms that estimate a_{CDOM} by remote sensing (Werdell et al. 2018; Aurin et al. 2018), in addition to being related to its composition and origin (Del Vecchio and Blough, 2002). A simple exponential model, Eq. (3), was used to calculate S_{CDOM} for wavelengths between 350 and 500 nm (Grunert et al. 2018; Favareto et al. 2018):

$$a_{CDOM}(\lambda) = A * \exp(-S * \lambda) \quad (3)$$

In turn, because $a_{CDOM}(\lambda)$ and $a_{NAP}(\lambda)$ have the same spectral shape, algorithms consider the absorption of these two components together (Werdell et al. 2007), given as $a_{dg}(\lambda)$. Therefore, the spectral slope of $a_{dg}(\lambda)$, S_{dg} , was also determined. For this, we only used the DB2 database because no measurements of $a_{NAP}(\lambda)$ between 250 and 400 nm were included in DB1. Finally, due to the spectral characteristics of the data analyzed in this study, the same calculations were conducted for the wavelength range of 370–412 nm.

Likewise, the spectral slope of $a_{phy}(\lambda)$, S_{phy} , was calculated with a simple linear model, Eq. (3), for the same wavelength intervals (350–500 nm and 370–412 nm):

$$a_{phy}(\lambda) = S_{phy} * \lambda + b \quad (4)$$

2.5. Chla concentration

The Chla concentration was determined by high-performance liquid chromatography (HPLC) following the method of Van-Heukelem and Thomas (2001), modified by Thomas (2012). An Agilent 1260 HPLC was used for this purpose, and the pigments were separated using a Zorbax Eclipse XDB C8. A gradient of three solvents was used: solvent A was 70:30 methanol:28 mM tetrabutyl ammonium hydroxide or TbAA (pH 6.5), solvent B was 100% methanol, and solvent C was 100% acetone.

2.6. Statistical analysis

The degree of association among the absorption coefficients and Chla concentrations was determined using the Pearson correlation coefficient (r_p). The statistical significance of the coefficient was determined from a hypothesis test based on degrees of freedom ($df = n-1$) and the α value (0.05), where $r_{critical}$ is the minimum significant value of r_p . If $r_p > r_{critical}$, the null hypothesis is rejected, and the association between variables A and B is statistically significant. If $r_p < r_{critical}$, the null hypothesis cannot be rejected, and r_p is not significant (Zar, 1999). To evaluate the goodness of fit of the linear models of the relationships between variables, we used the coefficient of determination (R^2 ; statistical significance of 95%). Finally, standardized anomalies were used to evaluate the magnitude of variation of the data and its dispersion around the climatological values. Standardized anomalies were calculated according to Eq. (5):

$$Z = \frac{Xi - \bar{X}}{SD} \quad (5)$$

where Z is the standardized variable, Xi is the value of the variable under analysis, \bar{X} is the average, and SD is the standard deviation.

2.7. Optical microscopy

To quantify and identify the phytoplankton in blooms, we followed the methods of Utermöhl (1958) using an IM inverted microscope with

phase contrast (Carl Zeiss, Oberkochen, Germany) and 25-mL sedimentation columns. After allowing the columns to rest for 24 h, the amount of sedimented material in the chamber after removing the column was determined. All genera and species were identified and quantified at 200x magnification, based on the guides of Tomas (1997), Almazán-Becerril et al. (2016), and the online databases algaebase.org and marinespecies.org. The following equation was used to calculate cell abundance:

$$Abundance(Cells L^{-1}) = (N * 1000) / Vol \quad (6)$$

where N is the number of cells of a taxon quantified at 200x, Vol is the sedimented volume (mL), and 1000 is the liter conversion factor.

3. Results

3.1. General bio-optical properties

The bio-optical variability of TSB is characterized by Chla concentrations between 0.11 and 36.2 mg m⁻³, with a median of 0.90 mg m⁻³ (Table 2). As such, the waters of the bay range from oligotrophic to eutrophic (Barocio-León et al., 2006).

The $a_{phy}(\lambda)$ spectrum exhibits a typical shape in the visible range, with maxima around 440 nm and 670 nm (Fig. 2a). However, peaks centered around ~ 280 nm, ~ 320 nm, and ~ 370 nm were also observed for stations in which UV measurements were taken, with values of up to 5 m⁻¹.

The $a_{CDOM}(\lambda)$ spectrum exhibited a spectral shape characterized by an exponential increase toward the UV range (Fig. 2b). However, in some spectra, marked peaks were observed between 300 and 370 nm. The $a_{NAP}(\lambda)$ spectrum also exhibited an exponential increase toward the UV range, with the maxima centered around ~ 280 nm (Fig. 2c). On the other hand, the $a_{dg}(\lambda)$ spectrum was very similar to that of $a_{CDOM}(\lambda)$, with maxima between 4 and 22 m⁻¹ (Fig. 2d).

The frequency distribution of the spectral slopes (S) in the interval of 350–500 nm was analyzed (Fig. 2). The majority of S_{phy} data ($\sim 90\%$) occurred between 0.00004 and 0.004 nm⁻¹ (Fig. 2a), with a median of 0.0010 nm⁻¹. For S_{CDOM} (Fig. 2b), 80% of the data were found between 0.020 and 0.030 nm⁻¹, with a median of 0.024 nm⁻¹. On the other hand, more than 90% of data for $S_{NAP}(\lambda)$ (Fig. 2c) were found between 0.008 nm⁻¹ and 0.012 nm⁻¹, with a median of 0.010 nm⁻¹. Lastly, $S_{dg}(\lambda)$ (Fig. 2d) exhibited the greatest number of data points ($\sim 70\%$) between 0.018 and 0.026 nm⁻¹, with a median of 0.021 nm⁻¹.

The linear relationship between the Chla concentration and the absorption coefficients at 440 nm and between $a_{NAP}(440)$ and $a_{CDOM}(440)$ were analyzed, in addition to the coefficient of determination (R^2) of the regression analysis (Table 3, Figure A.1). All correlations were positive and statistically significant, although the highest correlation was found between Chla and $a_{phy}(440)$. In this case, the coefficient of determination indicated that the Chla concentration explained 84.9% of the

Table 2

Range of variation, median, and number of samples (n) for the chlorophyll (Chla) concentration (mg m⁻³); the absorption coefficients of phytoplankton [$a_{phy}(440)$] (m⁻¹), colored dissolved organic matter [CDOM; $a_{CDOM}(440)$] (m⁻¹), non-algal particulate material [$a_{NAP}(440)$] (m⁻¹); and the spectral slopes of a_{phy} [S_{phy}] (nm⁻¹), a_{CDOM} [S_{CDOM}] (nm⁻¹), a_{NAP} [S_{NAP}] (nm⁻¹), and a_{CDOM} and a_{NAP} combined [S_{dg}] (nm⁻¹) for all sampling dates from 2016 to 2023.

	Chla	$a_{phy}(440)$	$a_{CDOM}(440)$	$a_{NAP}(440)$
Range	0.11 – 36.2	0.02 – 1.53	0.01 – 0.33	0.006 – 0.30
Median	0.98	0.07	0.05	0.03
n	127	121	120	123
	S_{phy} (350–500)	S_{CDOM} (350–500)	S_{NAP} (350–500)	S_{dg} (350–500)
Range	0.00003 – 0.0188	0.011–0.037	0.008 – 0.020	0.011 – 0.036
Median	0.0012	0.024	0.009	0.021
n	56	120	60	60

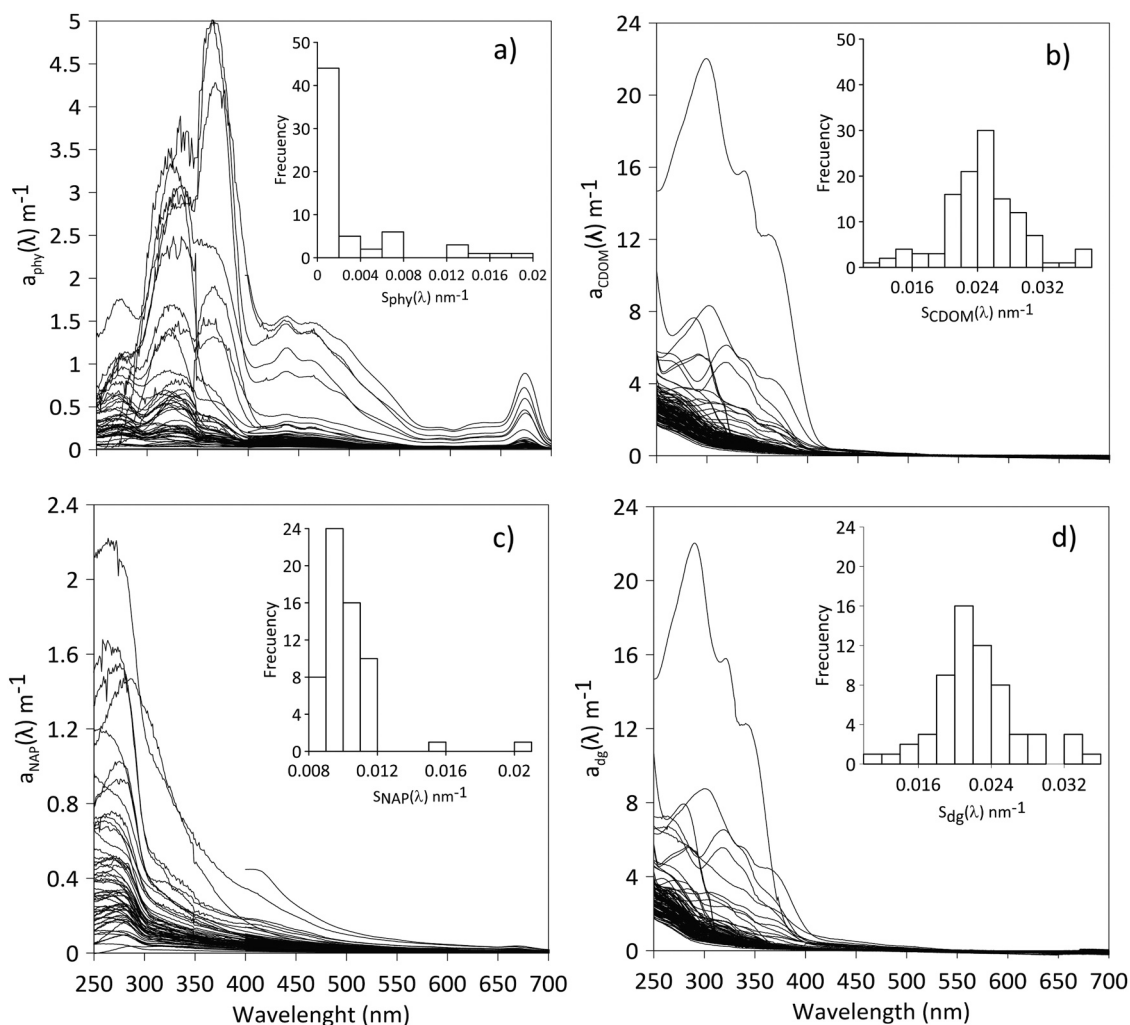


Fig. 2. Absorption spectra for the light absorption coefficients of (a) phytoplankton [$a_{phy}(\lambda)$], (b) colored dissolved organic matter [CDOM; $a_{CDOM}(\lambda)$], (c) non-algal particulate material [$a_{NAP}(\lambda)$], and (d) a_{CDOM} and a_{NAP} combined [$a_{dg}(\lambda)$] for all sampling events. Each panel shows the frequency histograms of the spectral slopes (S) calculated between 350 and 500 nm.

Table 3

Results of the correlation analysis and the percentage of variability (R^2) explained by the model. The correlation coefficient (r_p), the number of data points (n), and $r_{p\text{ critical}}$ are shown. When $r_p > r_{p\text{ critical}}$, the correlation coefficient is statistically significant.

Variable 1	Variable 2	r_p	n	$r_{p\text{ critical}}$	R^2
$a_{phy}(440)$	Chla	0.921	121	0.1778	0.848
$a_{CDOM}(440)$	Chla	0.629	120	0.1785	0.395
$a_{NAP}(440)$	$a_{CDOM}(440)$	0.541	116	0.1816	0.293

variability in $a_{phy}(440)$. On the other hand, although the correlation between $a_{CDOM}(440)$ was significant, it only explained 42.8% of the variability in $a_{CDOM}(440)$. This trend was also observed between $a_{NAP}(440)$ and $a_{CDOM}(440)$.

Considering the wide range of variability among Chla concentrations, it was necessary to objectively define when an increase in this variable reflected the presence of an algal bloom and for that we calculated the Chla standardized anomalies. Fig. 3 shows the standardized anomalies of the Chla concentration based on all measured data (n = 127; Table 2). In all, 93% of the data were represented by anomalies between -1 and 1 (Fig. 3). Thus, this climatology was deemed the baseline, and anomalies > 1 were classified as algal blooms. Eight cases in which the Chla concentration was greater than 7 mg m⁻³

were detected and classified as blooms. Descriptions of the baseline and phytoplankton bloom bio-optical properties are presented separately in Sections 3.2 and 3.3.

3.2. Baseline bio-optical properties

The baseline properties of TSB are defined by Chla concentrations that vary between 0.11 and 6.2 mg m⁻³ (n = 116; Fig. 4a). In all, 75% of the data showed values between 0.53 and 1.28 mg m⁻³, with a median of 0.85 mg m⁻³.

The values of $a_{phy}(440)$ ranged from 0.019 to 0.284 m⁻¹, with a median of 0.065 m⁻¹. The $a_{CDOM}(440)$ varied between 0.002 and 0.29 m⁻¹, with a median of 0.050 m⁻¹, and $a_{NAP}(440)$ varied between 0.006 and 0.14 m⁻¹, with a median of 0.031 m⁻¹ (Fig. 4a).

A ternary diagram was used to evaluate the percentage contribution of each component to light absorption (Fig. 4b). This allowed us to see that phytoplankton and CDOM were the dominant components in both the internal and external stations of TSB. An $a_{phy}(\lambda)$ contribution of 70% or more was only observed in three sampling trips from station B6, while a contribution of 70% or more by $a_{CDOM}(\lambda)$ was observed in two sampling trips from stations B2 and B6. No contributions of $a_{NAP}(440)$ greater than 40% were detected.

The spatial variation of Chla, $a_{phy}(440)$, $a_{CDOM}(440)$, and $a_{NAP}(440)$ in each station was analyzed (Fig. 5). The highest Chla concentrations

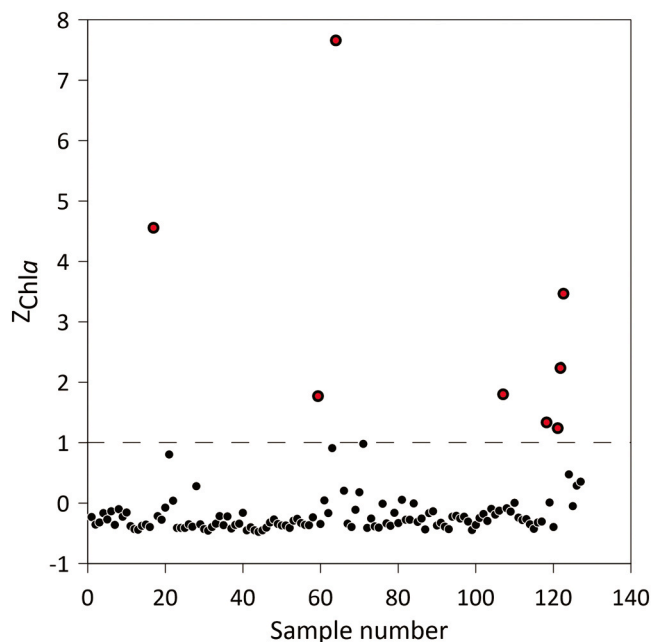


Fig. 3. Standardized anomalies of the chlorophyll (Chl_a) concentration (Z_{Chl_a}). Red dots indicate algal blooms ($Z_{Chl_a} > 1$); black dots are baseline data points (93% of all data).

were found in the internal stations of TSB (B4–B8). However, occasionally high Chl_a concentrations (up to 4.3 mg m^{-3}) were observed in station B2 (Fig. 5a).

The median of $a_{phy}(440)$ exhibited little spatial variability. However, maxima were found in either the internal stations or in external station B1 (Fig. 5b). The median of $a_{CDOM}(440)$ (Fig. 5c) was more variable than that of $a_{phy}(440)$, and the largest variability was observed in stations B1 and B6. Finally, although $a_{NAP}(440)$ exhibited the lowest contribution to light absorption (Fig. 4b), its highest values were observed in the internal stations (Fig. 5d).

3.3. Phytoplankton bloom bio-optical properties

Table 4 shows the eight blooms identified in this study (C1–C8) and

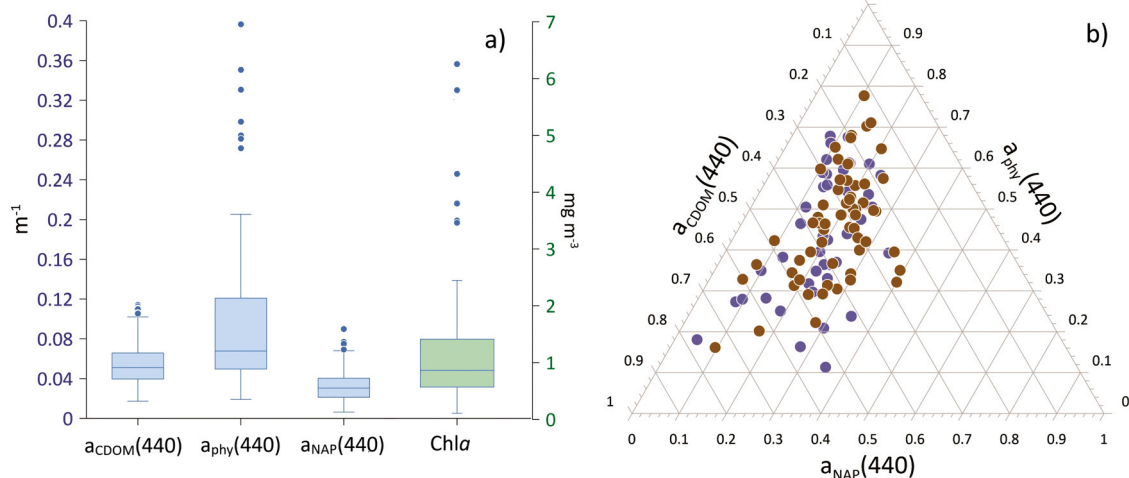


Fig. 4. (a) Boxplot constructed from the baseline data of the light absorption coefficients of colored dissolved organic matter [CDOM; $a_{CDOM}(440)$] (m^{-1}), phytoplankton [$a_{phy}(440)$] (m^{-1}), non-algal particulate material [$a_{NAP}(440)$] (m^{-1}), and the Chl_a concentration (mg m^{-3}) (m^{-1}). Dots indicate outliers. The whiskers show the maximum and minimum values, and the boxes show the quartiles (Q-25, median, and Q-75). (b) Ternary diagram constructed from the baseline data of the $a_{phy}(440)$, $a_{CDOM}(440)$, and $a_{NAP}(440)$ coefficients. Blue dots indicate the external stations, and brown dots indicate the internal stations.

their principal characteristics. The Chl_a concentration varied between 7.7 and 36.2 mg m^{-3} , while cell abundance ranged from $1.03 \cdot 10^3$ to $8.87 \cdot 10^3 \text{ cells L}^{-1}$. Overall, dinoflagellates dominated the blooms. *Lingulodinium polyedra* accounted for more than 65% of all cells in blooms C1, C2, C3, and C5, while *Prorocentrum micans* was the dominant species ($> 48\%$) in blooms C7 and C8. No dominant species were identified in blooms C4 or C6. In bloom C4, *P. micans*, *Gymnodinium* sp., and *L. polyedra* made up 67% of all algal cells, with *P. micans* being the most abundant (“mix dino” in Table 4). In bloom C6, *Cochlodinium* sp., *Gymnodinium* sp., *L. polyedra*, and *P. micans* comprised 66% of all cells, with *Cochlodinium* sp. and *L. polyedra* being the most abundant. Descriptions of the genera and species present in each bloom are given in Appendix A (Tables A1 to A7). In each bloom, $a_{phy}(440)$ contributed the most to light absorption. Finally, S_{phy} varied between 0.002 and 0.018 nm^{-1} , while S_{CDOM} and S_{dg} varied between 0.025 and 0.037 nm^{-1} and 0.023– 0.032 nm^{-1} , respectively.

The spectral curves of $a_{phy}(\lambda)$, $a_{CDOM}(\lambda)$, and $a_{dg}(\lambda)$ of the blooms were compared with the baseline spectra (Fig. 6), which was calculated as the median of the measurements described in the previous Section (3.2). The objective was to identify particular characteristics of their shape and magnitude and compare them among blooms.

In all cases, the magnitude of the $a_{phy}(\lambda)$ values was greater during blooms compared to that of the baseline spectrum (Fig. 6a). This was particularly notable in the UV region, where two peaks centered around $\sim 320 \text{ nm}$ and $\sim 370 \text{ nm}$ (especially at 370 nm) were absent from the baseline spectrum. The presence of these peaks was associated with a marked increase in $a_{phy}(\lambda)$ between 410 and 370 nm , which was more evident in blooms dominated by *L. polyedra* or *P. micans*. A subsequent peak at 330 nm was observed in both the baseline and bloom spectra, although its magnitude was much larger in blooms.

To better evaluate changes in maximum absorption wavelengths during blooms and compare these with the baseline spectrum, the shape of the spectra was evaluated by normalizing $a_{phy}(\lambda)$ with the maximum value between 250 and 700 nm (Fig. 6b). The spectral shape of the baseline was defined by peaks at 280 and 330 nm , in addition to those between 440 and 670 nm (visible range). In a bloom, marked increases at 330 and 370 nm were notable. However, with the exception of bloom C6 (June 2022), a peak was not observed at 280 nm .

Similar trends were present in the $a_{CDOM}(\lambda)$ and $a_{dg}(\lambda)$ spectra (Fig. 6c,d), indicating the predominance of CDOM in defining $a_{dg}(\lambda)$. These patterns were characterized by a pronounced slope between 370 and 400 nm , which was weaker or non-existent in blooms C4 and C6

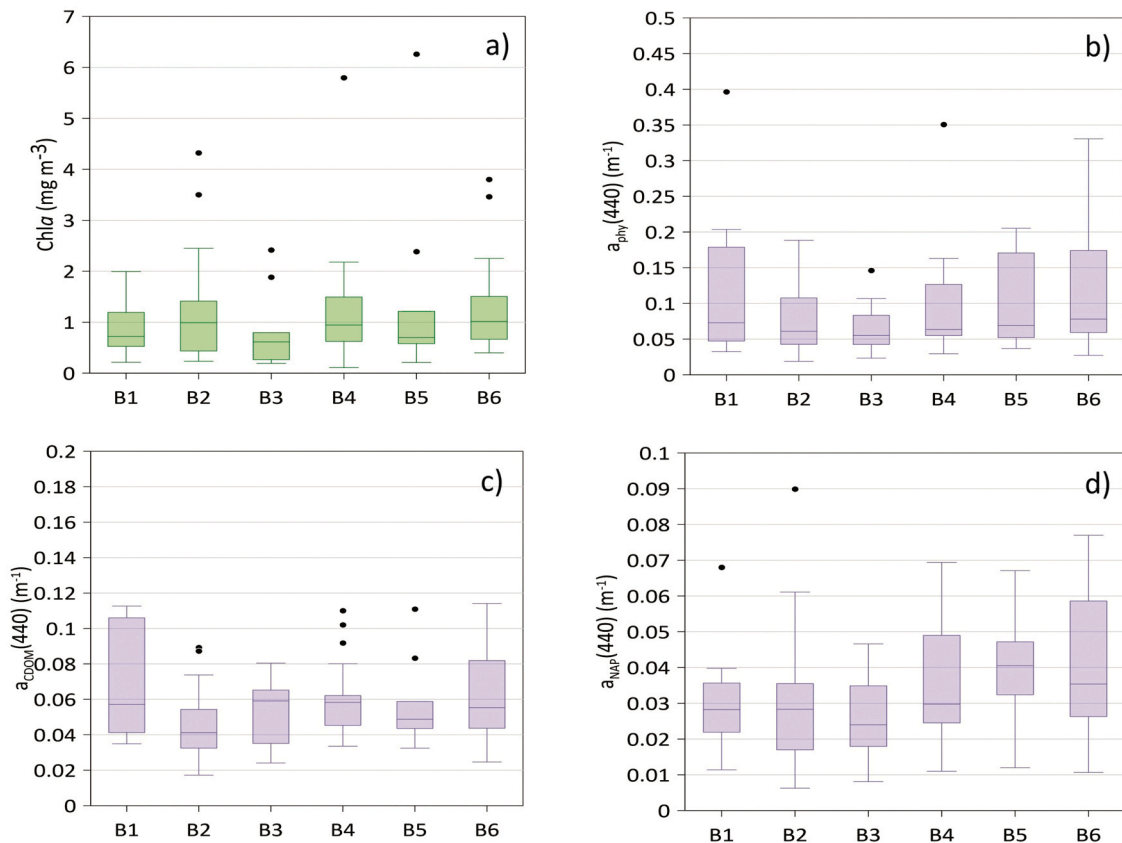


Fig. 5. Boxplots constructed from the baseline data of the (a) chlorophyll (Chla) concentration (mg m⁻³) and the light absorption coefficients of (b) phytoplankton [a_{phy}(440)] (m⁻¹), (c) colored dissolved organic matter [CDOM; a_{CDOM}(440)] (m⁻¹), and (d) non-algal particulate material [a_{NAP}(440)] (m⁻¹). Dots indicate outliers. The whiskers show the maximum and minimum values, and the boxes show the quartiles (Q-25, median, and Q-75).

Table 4

Chla concentration (mg m⁻³), number of cells of the dominant species (x 10³ cells L⁻¹), and dominant species (percentage of the total number of cells); the light absorption coefficients of phytoplankton [a_{phy}(440)] (m⁻¹), colored dissolved organic matter [CDOM; a_{CDOM}(440)] (m⁻¹), and non-algal particulate material [a_{NAP}(440)] (m⁻¹); and the spectral slopes of a_{phy} [S_{phy} (350–500)], a_{CDOM} [S_{CDOM} (350–500)] (nm⁻¹), and a_{CDOM} and a_{NAP} combined [S_{dg} (350–500)] (nm⁻¹) of the bloom samples. The percentage contribution of each component to light absorption is given in parentheses. Labels C1 to C8 were added to identify each bloom event in the text and figures.

I	Date	Station	Chla	Cells	Dominant species	a _{phy}	a _{CDOM}	a _{NAP}	S _{CDOM}	S _{dg}	S _{phy}
C1	30 May 2017	Beach	22.5	-	<i>L. polyedra</i>	1.53 (74%)	0.23 (11%)	0.30 (14%)	0.031	-	-
C2	8 June 2019	B1	9.9	1.03	<i>L. polyedra</i> (85%)	0.39 (68%)	0.15 (26%)	0.03 (6%)	0.025	0.024	0.005
C3	8 June 2019	B6	36.2	6.27	<i>L. polyedra</i> (87%)	1.48 (78%)	0.32 (17%)	0.09 (5%)	0.027	0.026	0.013
C4	12 November 2021	B6	10.2	1.90	Mix dino (65%)	1.17 (85%)	0.09 (6%)	0.12 (9%)	0.029	0.023	0.012
C5	23 March 2022	B8	8.1	1.69	<i>L. polyedra</i> (65%)	0.27 (73%)	0.06 (16%)	0.04 (11%)	0.029	0.028	0.007
C6	24 June 2022	B6	7.7	1.09	Mix dino (66%)	0.33 (73%)	0.08 (18%)	0.04 (9%)	0.027	0.024	0.002
C7	20 April 2023	B9	12.3	8.48	<i>P. micans</i> (52%)	0.90 (78%)	0.12 (10%)	0.17 (12%)	0.036	0.032	0.018
C8	20 April 2023	B10	17.6	8.87	<i>P. micans</i> (48%)	1.44 (87%)	0.10 (6%)	0.11 (7%)	0.037	0.032	0.017

(“dino mix”). Furthermore, pronounced peaks were observed between 310 and 330 nm in some cases, which were more marked in blooms C1 and C3, which were dominated by *L. polyedra*.

To more clearly describe the differences in the spectral shape of a_{phy}(λ) between bloom and baseline spectra, we plotted the values at 280, 330, and 370 nm, the wavelengths with the most notable changes (Fig. 7). The baseline spectrum was characterized by having the greatest relative absorption at 280 nm rather than at 330 or 370 nm. However, blooms dominated by *L. polyedra* (C2, C3, and C5) and *P. micans* (C7 and C8) were characterized by showing maximum absorption at 370 nm,

followed by less absorption at 330 nm and minimum absorption at 280 nm. On the other hand, in the blooms formed by several species of dinoflagellates (C4 and C6), maximum absorption occurred at 330 nm, followed by that at 280 nm.

Finally, S_{phy}, S_{CDOM}, and S_{dg} were calculated in the intervals of 350–500 (Fig. 8a) and 370–412 (Fig. 8b) nm and analyzed with respect to the Chla concentration. The median calculated from the data that made up the baseline (solid line in the figures) were included in the analysis. For the interval of 350–500 nm (Fig. 8a), the S_{phy} data of the eight blooms exhibited values higher than the median. However, while

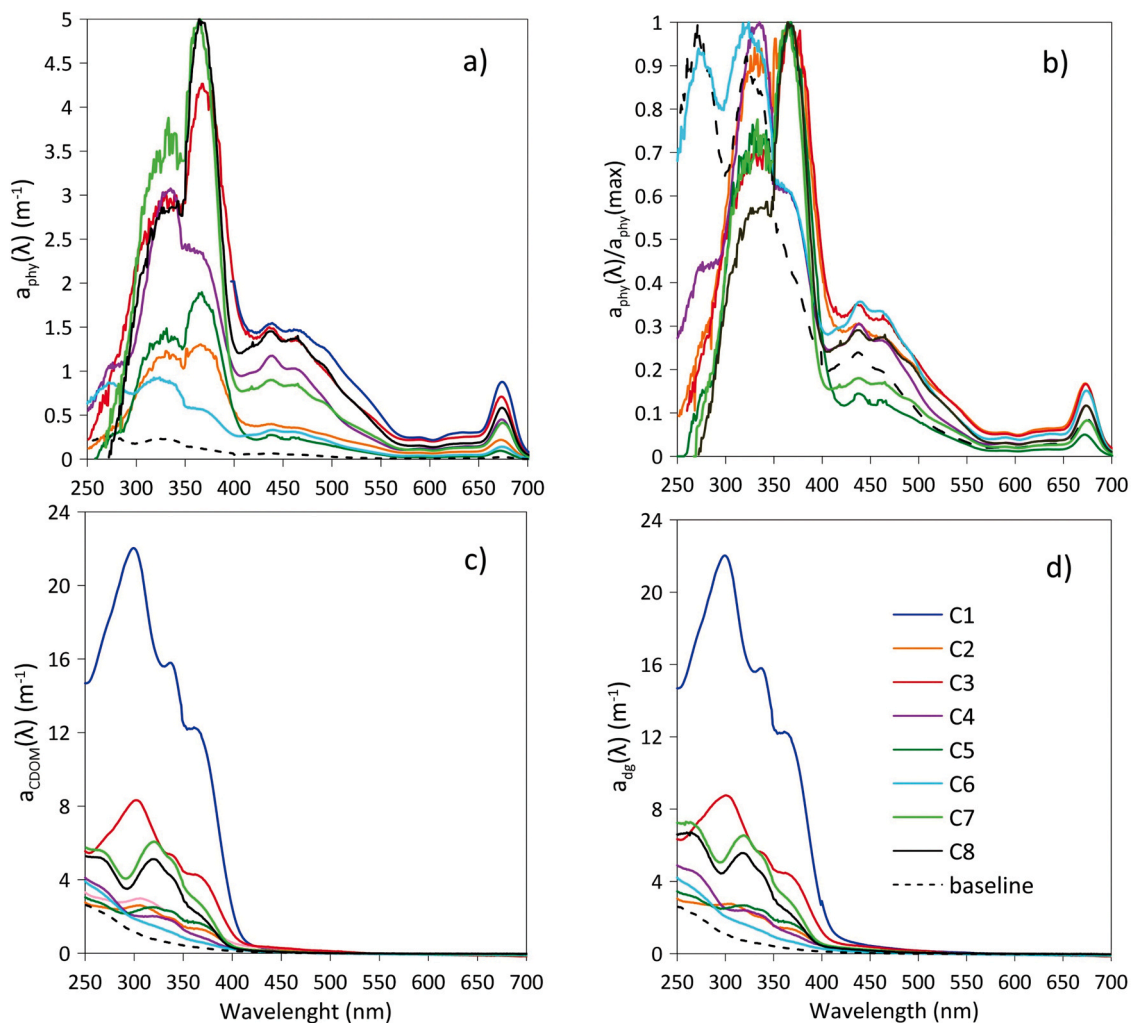


Fig. 6. Absorption spectra of the light absorption coefficients of (a) phytoplankton [$a_{phy}(\lambda)$] (m^{-1}), (b) colored dissolved organic matter [CDOM; $a_{CDOM}(\lambda)$] (m^{-1}), and c) $a_{CDOM}(\lambda)$ and $a_{NAP}(\lambda)$ combined [$a_{dg}(\lambda)$] (m^{-1}) for blooms. In each panel, the baseline spectrum is shown with a dotted line.

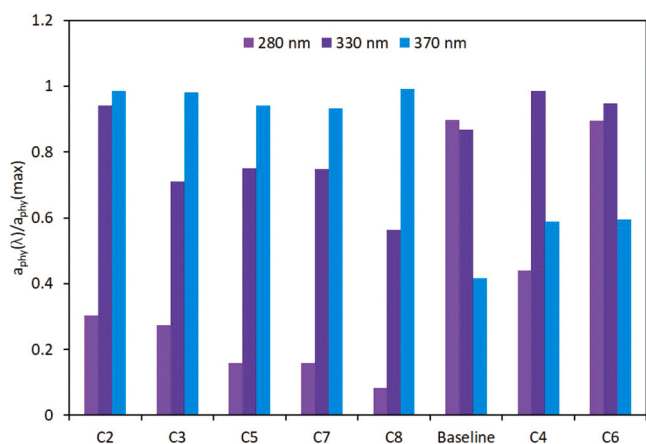


Fig. 7. Values of the spectral shape of $a_{phy}(\lambda)/a_{phy}(\max)$ at 280, 330, and 370 nm for blooms (C2–C8) and baseline spectra. $a_{phy}(\lambda)$: light absorption coefficient of phytoplankton.

some values of S_{CDOM} and S_{dg} were higher than the median, others were very close to or below it. In addition, S_{phy} increased almost linearly as the Chla concentration increased, although it decreased when the maximum Chla concentration was observed (36.2 mg m^{-3}). No clear

relationship was observed between S_{CDOM} or S_{dg} and Chla.

When analyzing the spectral slopes calculated in the interval of 370–412 nm (Fig. 8b), the bloom data were always higher than the median, especially in the case of S_{phy} . For example, in the April 2023 blooms (C7 and C8), which were characterized by Chla concentrations of 12.3 and 17.6 mg m^{-3} , respectively, S_{phy} exhibited values of 0.092 and 0.088 nm^{-1} , respectively. These values were seven times higher than the baseline median (0.013 nm^{-1}). Again, S_{phy} increased as the Chla concentration increased, with the exception of bloom C3 (36.2 mg m^{-3}).

4. Discussion

4.1. Baseline bio-optical properties

Todos Santos Bay is a coastal body of water with variable conditions that range from oligotrophic ($\text{Chla} < 0.2 \text{ mg m}^{-3}$) and mesotrophic ($\text{Chla} 0.2\text{--}2 \text{ mg m}^{-3}$) to eutrophic ($\text{Chla} > 2 \text{ mg m}^{-3}$). Water bodies, such as TSB, can be classified as either Case 1 or Case 2 waters based on the inherent optical properties. In Case 1 waters, only phytoplankton and the degradation of phytoplankton products determine these properties, while in Case 2 waters (or optically complex waters), phytoplankton, non-algal particles, and CDOM influence optical properties (IOCCG, 2000). Todos Santos Bay is optically complex, given the different components that contribute to its observed light absorption

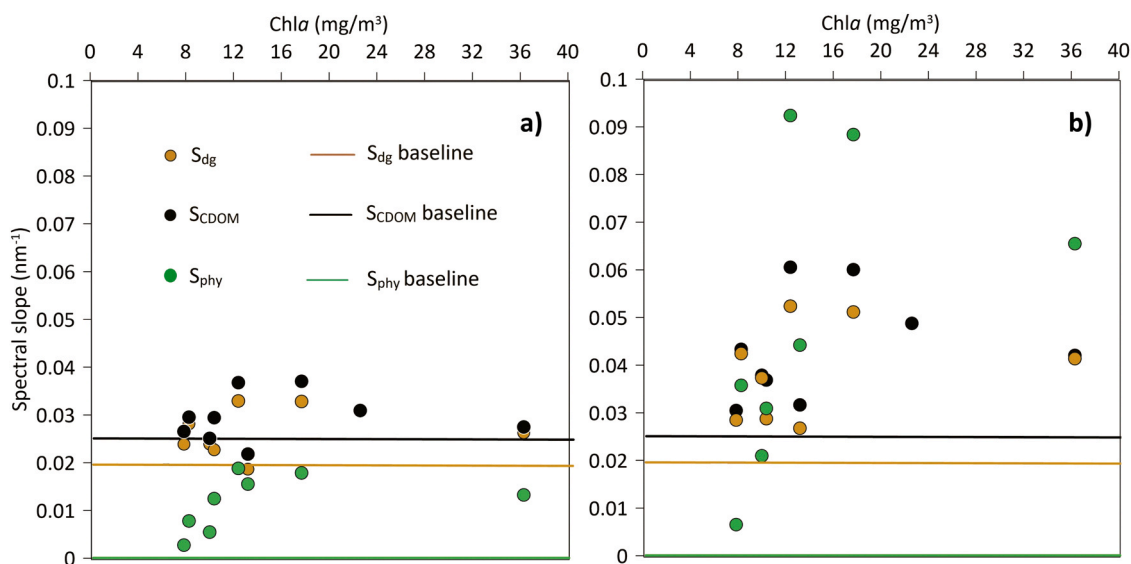


Fig. 8. Spectral slope values calculated in the intervals of (a) 350–500 nm and (b) 370–412 nm for each bloom. The solid lines are statistical medians calculated from the baseline data.

(Fig. 4b), and its waters may be categorized as Case 2, although without a clear distinction between the internal and external zones of the bay. In TSB, CDOM and phytoplankton are the greatest contributors to light absorption (Fig. 4b).

The variability of $a_{\text{phy}}(440)$ is largely determined by the Chla concentration and by divinyl chlorophyll *a* (DVChla) when *Prochlorococcus* sp. is present (Bricaud et al. 2010). In this study, the ample variability of $a_{\text{phy}}(440)$ ($0.02\text{--}1.53\text{ m}^{-1}$) was explained by that of the Chla concentration ($0.11\text{--}36.2\text{ mg m}^{-3}$). These values reflect a body of water with highly variable conditions despite its relatively small surface area ($\sim 190\text{ km}^2$; Flores-Vidal et al. 2018). In turn, this agrees with the high correlation between these two variables and the amount of variation explained by the linear model ($R^2 = 85\%$, Table 3). The unexplained variability (15%) may be the result of accessory pigments that absorb light at that same wavelength (440 nm), which differ according to the taxonomic composition (Jeffrey et al. 1997), cell size, or photoacclimation processes of the phytoplankton community (Bricaud et al. 2004, 2010). The phytoplankton communities of TSB exhibit great taxonomic diversity and differences in organism size (García-Mendoza et al. 2009; Almazán-Becerril et al. 2016; Ramírez-Altamirano et al. 2023) and respond to seasonal, interannual, and geographic forcing in both the internal and external zones of the bay. Spatially, these differences are marked by a greater abundance of dinoflagellates in the internal zone of the bay, where harmful algal blooms develop, and diatoms in the external zone (Ramírez-Altamirano et al. 2023). Nanoflagellates, such as Chlorophytes and Prymnesiophytes, are distributed homogeneously between the internal and external zones and tend to increase in abundance during the warm months (Ramírez-Altamirano et al. 2023). Nonetheless, these differences do not significantly affect $a_{\text{phy}}(440)$ (Fig. 5b).

Also called gelbstoff, gilvin, or yellow matter, CDOM is a vital component that influences the optical properties of nearshore environments, including bays and estuaries (Nelson et al., 2002). The origins of CDOM may be allochthonous (i.e., formed by sources external to where it is found, with its sources and transport regulated by land-ocean interactions) or autochthonous (i.e., derived from the products of the long-term breakdown of primary production; Siegel et al. 2002; Del Vecchio and Blough, 2002; Das et al. 2017). One cause of the increase in $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ in the UV range of the spectrum (300–400 nm) is the release of proteins or phenols by phytoplankton (Aurin et al. 2018) or various mycosporine-like amino acids (MAAs) often produced by dinoflagellates (Kahru and Mitchell, 1998; Whitehead and Vernet, 2000; Carignan and

Carreto, 2013; Weiss et al. 2022). In TSB, $a_{\text{CDOM}}(440)$ was highly variable ($0.01\text{--}0.33\text{ m}^{-1}$; Table 2) yet within the ranges reported by other authors for oceanic and coastal waters (Del Vecchio and Blough, 2002; Babin et al. 2003; Nelson et al., 2002; Nima et al. 2019). This ample variability may be related to the highly dynamic conditions of the bay (as observed with $a_{\text{phy}}(440)$ and Chla). Indeed, Chla and $a_{\text{CDOM}}(440)$ were highly correlated ($r_p = 0.655$; Table 3), with Chla explaining 42.8% of the variability, indicating an origin related to phytoplankton activity. However, the notable percentage of 57.2% not explained by Chla indicates that another origin is also present.

The origins of CDOM have been evaluated using spectral slopes, which depend on the light reactivity of the chromophores of the different CDOM types (Grunert et al., 2018). However, their variation intervals or relationships with the types of CDOM present depend on the wavelength interval used to calculate S_{CDOM} (Grunert et al. 2018). Our study employed the intervals of 350–500 nm and 370–412 nm. The interval of 350–500 nm is the most widely used in semi-analytical models to remotely estimate a_{CDOM} or a_{dg} (Lee et al. 2002; Maritorena et al. 2002; Werdell et al. 2013; Betancur-Turizo et al. 2018; Favareto et al. 2018). The interval of 370–412 nm considers the spectral changes observed in our data in that wavelength range.

Generally, $S_{\text{CDOM}}(350\text{--}500\text{ nm})$ is lower in coastal areas near continental inputs ($0.013\text{--}0.018\text{ nm}^{-1}$) and higher in the open ocean (0.025 nm^{-1} or more; Del Vecchio and Blough, 2002; Babin et al. 2003; Grunert et al. 2018). In this study, the variability interval of $S_{\text{CDOM}}(350\text{--}500)$, $0.011\text{--}0.037\text{ nm}^{-1}$, reflects the transition from coastal to oceanic conditions within the bay. In turn, this suggests that both allochthonous and autochthonous sources of this component are present. The high correlation between $a_{\text{CDOM}}(440)$ and Chla may explain the autochthonous contributions. However, multiple macroalgae forests are distributed within the bay (Arafah-Dalmau et al., 2019), which produce dissolved organic matter (DOM) and exudates (Reed et al. 2015; Weigel and Pfister, 2021; Peng et al., 2023) that may increase CDOM. In addition, although stormwater runoff in this region is scarce and seasonal, frequent wastewater discharges (Tanahara et al. 2021) are important sources of allochthonous CDOM in TSB. The resuspension of bottom sediments can also increase CDOM (Dittmar and Stubbins, 2014; Martias et al. 2018), which may be particularly important in shallow areas and affect the concentrations of non-algal particles.

Although $a_{\text{NAP}}(440)$ generally contributed the least to light absorption, it tended to be higher in stations near the coast in this study (Fig. 5d). The significant correlation between $a_{\text{CDOM}}(440)$ and $a_{\text{NAP}}(440)$

indicates that the presence of both components is due to a common source, although to a low degree ($R^2 = 0.29$). All this leads us to suggest that the possible sources of CDOM and their relationships with the spectral quality and quantity of light in the water column should be studied in further detail, given their roles in biogeochemical cycles and their importance in accurately estimating a_{CDOM} or a_{dg} using satellite-based remote sensing methods.

In satellite-based remote sensing, S_{dg} is used as a quasi-constant parameter in semi-analytical inversion models, such as the GIOP (Generalized Inherent Optical Property model), which employs an S_{dg} value of 0.018 nm^{-1} to estimate $a_{\text{dg}}(443)$ (Werdell et al. 2013). In our study, 90% of the $S_{\text{dg}}(350\text{--}500)$ data varied between 0.018 and 0.026 nm^{-1} (median of 0.021 nm^{-1}), an interval associated with oligotrophic and mesotrophic waters with few continental inputs (Babin et al. 2003; Favareto et al. 2018). However, the wide variability observed in our data must also be considered in inversion models, as suggested by Betancur-Turizo et al. (2018), who showed that models in which S_{dg} is constant “are too simplified to capture the expected variability of real data in optically complex waters.”.

4.2. Light absorption properties of dinoflagellate blooms

The results of this study show that dinoflagellate blooms are associated with marked anomalies in the spectra of $a_{\text{phy}}(\lambda)$, $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$, and $a_{\text{dg}}(\lambda)$ (Fig. 6), which is most likely due to MAA production. However, this pattern varied according to the dominant species and Chl a concentration of the phytoplankton bloom. This result is not unexpected, considering that different species of phytoplankton and macroalgae produce different compounds and MAA types (Weiss et al. 2022).

In our study, the phytoplankton species with the most marked responses were *L. polyedra* and *P. micans*, which were especially notable in $a_{\text{phy}}(\lambda)$. Kahru and Mitchell (1998) described increases in $a_{\text{phy}}(380)$ during an *L. polyedra* bloom off the coast of California, attributing concentrations of Chl a greater than 10 mg m^{-3} to the production of MAAs. Vernet and Whitehead (1996) identified the production of MAAs by *L. polyedra* and the maximum light absorption of this species at 360 nm, which coincides with the maxima observed in our data ($\sim 370 \text{ nm}$). In turn, Carignan and Carreto (2013) identified the production of a specific MAA (M-333) by *P. micans*, with maximum absorption at $\sim 330 \text{ nm}$.

Nonetheless, it is necessary to highlight what occurred in two blooms (C4 and C6) in which no single phytoplankton species was dominant. Bloom C4 developed in November when the abundance of *P. micans* was elevated and *L. polyedra* and *Gymnodinium* sp. were dominant. The $a_{\text{phy}}(\lambda)$ spectrum indicated that maximum absorption occurred at 330 nm, while those of $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ and $a_{\text{dg}}(\lambda)$ contained values that were slightly above the baseline. On the other hand, bloom C6 occurred in June when *Cochlodinium* sp. and *L. polyedra* were present in similar abundance, along with *Gymnodinium* sp. and *P. micans*. The Chl a concentration in bloom C6 (7.7 mg m^{-3}) was the lowest of all blooms in this study, with $a_{\text{phy}}(\lambda)$ and $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ being closest to the baseline spectrum (Fig. 6a,c). Although maximum absorption was observed at 330 nm, its spectral shape was very similar to that of the baseline spectrum (Fig. 6b and Fig. 7).

These results lead us to consider the following three points. First, the season of the year in which a bloom develops and its effect on the amount of UV radiation at the sea surface influence the production of MAAs by dinoflagellates or other phytoplankton species (Weiss et al. 2022). For example, Tartarotti and Sommaruga, (2006) recorded seasonal changes in the concentration of phytoplankton MAAs, with values that were 3.0-fold higher in the summer than in the cold period. Second, the dominant species in each bloom will affect the characteristics of the bloom, given that different species produce different MAAs (Weiss et al. 2022, Peng et al. 2023). Third, the Chl a concentration and cellular abundance associated with each bloom may have affected the signal intensity of our data. This last point is partially explained by the

increasing slope of S_{phy} as the Chl a concentration increased. Nonetheless, seasonal variability should also be considered.

Most blooms occurred between spring and summer, with the exception of bloom C4 (November 2022). This bloom exhibited a high Chl a concentration equal to that of bloom C2 (June 2022), a different absorption maximum (330 instead of 370), and a spectral slope very close to that of the baseline. Although the association between dinoflagellate blooms (especially those dominated by *L. polyedra* and *P. micans*) and MAA production coincides with that reported by other studies, future research should focus on the production dynamics of MAAs in TSB to understand the factors responsible for its variability.

5. Conclusions: implications for the remote detection of dinoflagellate blooms

The vast majority of studies employing remote detection methods for algal blooms in oceanic and coastal waters have been limited to analyses of the visible portion of the electromagnetic spectrum (400–700 nm; Astoreca et al. 2005, 2009; Barocio-León et al. 2008; Lubac et al. 2008; Blondeau-Patissier et al. 2014; Luz and Noernberg, 2022). The reason for this is that remote sensor bands are centered on this region of the spectrum. Recently, Kahru et al. (2021) demonstrated the potential of using a UV-to-blue reflectance ratio ($R_{\text{rs}380}:R_{\text{rs}443}$) to detect *L. polyedra* HABs off the California coast (USA). The result is especially important in light of the launch of the Plankton, Aerosol, Cloud, and ocean Ecosystem (PACE) Mission of the National Aeronautics and Space Administration (NASA, USA). The primary sensor of PACE is the Ocean Color Instrument (OCI), a hyperspectral imaging spectrometer with continuous coverage from 315 to 895 nm (resolution of 2.5 nm).

The results of our study confirm and highlight the potential of using information derived from the UV region of the electromagnetic spectrum to detect dinoflagellate blooms, as proposed by Kahru et al. (2021). However, our results also show that the signal detected by these authors in *L. polyedra* blooms is not exclusive to this species and may be associated with blooms dominated by other dinoflagellate species such as *P. micans*. Furthermore, S_{phy} , S_{CDOM} , and S_{dg} are influenced by bloom events. However, this influence is more evident when the spectral slope is calculated from 370 to 412 nm, which better defines the substantial increase in absorption in this interval.

In this study, the slope of S_{phy} was furthest from the median when compared to those of S_{CDOM} and S_{dg} . Thus, this slope shows potential for bloom detection. So far, the PACE Mission has defined $a_{\text{phy}}(\lambda)$ and $a_{\text{dg}}(\lambda)$ as its OCI standard products and $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ and S_{CDOM} (among others) as test products. Our study highlights a need to explore the possible applications of our results to the novel data generated by the PACE Mission. This exploration requires in situ observations to accurately discriminate the relationships among the phytoplanktonic groups and species involved in blooms, their relationships with MAA production, and their influence on absorption coefficients, spectral slopes, and marine reflectance.

The detection of HABs using spectral slopes in the range proposed in this study (UV–VIS) is not only valid in remote sensing. Although the benefits of monitoring different water bodies with remote sensors are numerous, there are disadvantages to deriving various satellite products. First, coastal bodies of water exhibit variable geographic characteristics (e.g., lagoons and estuaries) and are typically small. Thus, the spatial resolution of satellite sensors is often limited and insufficient when focused on these areas. Second, the waiting time involved in obtaining satellite products, which can vary from days to weeks, becomes relevant when we consider that multiple sectors of society require timely information on water quality and the presence of anomalous events. Thus, there is great potential in applying the results of this study to real-time measurements obtained from sensors attached to either buoys or unmanned aerial vehicles (UAVs).

Altogether, our observations encompass an integral approach to better detect a complex environmental and biological phenomenon such

as HABs. Although, methods and techniques evaluating the optical properties of the ocean may have independent inherent inaccuracies, our study illustrates how an integral evaluation may strengthen our understanding of an environmental event. We found this relevant considering emerging technologies and methodologies, and thus we suggest, based on the extent of our experience, to future studies consider an integral approach in which each piece of information allows to inform a complementary perspective to better detect and evaluate currently relevant environmental events, such as HABs in coastal regions worldwide.

Funding

This work was conducted with support from the CONAHCyT (project CF-2019-1327711) and POGO and Nippon foundation (NF-POGO) through the NANO-DOAP project (<https://nf-pogo-alumni.org/project/s/global/>). The author M. Larios-Muñiz was supported by a PhD scholarship (CONAHCyT-Grant 927633). The author M.E. Guzman-Hernandez was supported by a MSc scholarship (CONAHCyT-Grant 943397).

Author statement

This is to certify that all authors have seen and approved the final version of the manuscript being submitted. We warrant that the article is the authors' original work, hasn't received prior publication and isn't under consideration for publication elsewhere.

CRedit authorship contribution statement

Stella Betancur-Turizo: Writing – review & editing, Methodology, Formal analysis. **Mónica Torres-Beltrán:** Writing – review & editing, Methodology, Formal analysis. **Eduardo Santamaria-del-Ángel:** Writing – review & editing, Software, Methodology, Formal analysis. **María Ester Guzman-Hernandez:** Writing – review & editing, Methodology. **Mariana Larios-Muñiz:** Writing – original draft, Methodology, Investigation, Formal analysis, Conceptualization. **Adriana Gonzalez-Silvera:** Writing – original draft, Project administration, Methodology, Funding acquisition, Formal analysis, Conceptualization. **Jorge López-Calderón:** Writing – review & editing, Methodology, Formal analysis, Conceptualization.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Data availability

Data will be made available on request.

Acknowledgements

We appreciate the support of students and technical staff of the Faculty of Marine Sciences and the Oceanological Research Institute (UABC) on board the ship and in the laboratory in generating the database used in this study. Thanks to the anonymous reviewers and Andrea Lievana MacTavish for English editing.

Appendix A. Supporting information

Supplementary data associated with this article can be found in the online version at [doi:10.1016/j.rsmas.2024.103438](https://doi.org/10.1016/j.rsmas.2024.103438).

References

- Aguilar-Maldonado, J.A., Santamaría-del-Ángel, E., Gonzalez-Silvera, A., Cervantes-Rosas, O.D., López, L.M., Gutiérrez-Magness, A., Cerdeira-Estrada, S., Sebastián-Frasquet, M.T., 2018. Identification of phytoplankton blooms under the index of inherent optical properties (IOP Index) in optically complex. *Water* 10, 129. <https://doi.org/10.3390/w10020129>.
- Aguilar-Maldonado, J.A., Santamaría-del-Ángel, E., Gonzalez-Silvera, A., Sebastián-Frasquet, M.T., 2019. Detection of phytoplankton temporal anomalies based on satellite inherent optical properties: a tool for monitoring phytoplankton blooms. *Sensors* 19, 3339. <https://doi.org/10.3390/s19153339>.
- Almazán-Becerril, A., Aké-Castillo, J.A., García-Mendoza, E., Sánchez-Bravo, Y.A., Escobar-Morales, S. and Valadez-Cruz, F. (2016). Catálogo de microalgas de Bahía de Todos Santos, Baja California, México. CICESE, Ensenada.
- Aurin, D., Mannino, A., Lary, D.J., 2018. Remote sensing of CDOM, CDOM spectral slope, and dissolved organic carbon in the global ocean. *Appl. Sci.* 8 (12), 2687. <https://doi.org/10.3390/app8122687>.
- Astoreca, R., Rousseau, V., Ruddick, K., Van Mol, B., Parent, J.Y., and Lancelot, C. (2005). Optical properties of algal blooms in an eutrophicated coastal area and its relevance to remote sensing. In *Remote Sensing of the Coastal Oceanic Environment* (Vol. 5885, pp. 245-255). Edited by Robert J. Frouin, Marcel Babin, Shubha Sathyendranath. Proc. of SPIE Vol. 5885 (SPIE, Bellingham, WA, 2005) : 0277-786X/05/\$15 <https://doi.org/10.1117/12.615160>.
- Arafah-Dalmau, N., Montaña-Moctezuma, G., Martínez, A., Beas-Luna, R., Schoeman, D. S., Torres-Moye, G., 2019. Extreme marine heatwaves alter kelp forest community near its equatorward distribution limit. *Front. Mar. Sci.* 6, 499. <https://doi.org/10.3389/fmars.2019.00499>.
- Astoreca, R., Rousseau, V., Lancelot, C., 2009. Coloured dissolved organic matter (CDOM) in Southern North Sea waters: Optical characterization and possible origin. *Estuar. Coast. Shelf Sci.* 85 (4), 633–640. <https://doi.org/10.1016/j.ecss.2009.10.010>.
- Babin, M., Stramski, D., Ferrari, G., Clauastre, H., Bricaud, A., Obolensky, G., Hoepffner, N., 2003. Variations in the light absorption coefficients of phytoplankton, non-algal particles, and dissolved organic matter in coastal waters around Europe. *J. Geophys. Res. Oceans* 108 (C7). <https://doi.org/10.1029/2001JC000882>.
- Barocio-León, O., Millán-Núñez, R., Santamaria-del-Ángel, E., Gonzalez-Silvera, A., Trees, C.T., 2006. Spatial variability of phytoplankton absorption coefficient and pigments off Baja California during November 2002. *J. Oceanography* 62, 873–885. <https://doi.org/10.1007/s10872-006-0105-z>.
- Barocio-León, O.A., Millán-Núñez, R., Santamaría-del-Ángel, E., Gonzalez-Silvera, A., Trees, C.C., Orellana-Cepeda, E., 2008. Bio-optical characteristics of a phytoplankton bloom event off Baja California Peninsula (30–31 N). *Cont. Shelf Res.* 28 (4-5), 672–681. <https://doi.org/10.1016/j.csr.2007.12.002>.
- Betancur-Turizo, S.P., González-Silvera, A., Santamaría-del-Ángel, E., Tan, J., Frouin, R., 2018. Evaluation of semi-analytical algorithms to retrieve particulate and dissolved absorption coefficients in Gulf of California optically complex waters. *Remote Sens.* 10 (9), 1443. <https://doi.org/10.1016/j.csr.2007.12.002>.
- Blondeau-Patissier, D., Gower, J.F., Dekker, A.G., Phinn, S.R., Brando, V.E., 2014. A review of ocean color remote sensing methods and statistical techniques for the detection, mapping and analysis of phytoplankton blooms in coastal and open oceans. *Prog. Oceanogr.* 123, 123–144. <https://doi.org/10.1016/j.pcean.2013.12.008>.
- Bricaud, A., Claustre, H., Ras, J., Oubelkheir, K., 2004. Natural variability of phytoplanktonic absorption in oceanic waters: Influence of the size structure of algal populations. *J. Geophys. Res.: Oceans* 109 (C11). <https://doi.org/10.1029/2004JC002419>.
- Bricaud, A., Babin, M., Claustre, H., Ras, J., Tièche, F., 2010. Light absorption properties and absorption budget of Southeast Pacific waters. *J. Geophys. Res.: Oceans* 115 (C8). <https://doi.org/10.1029/2009JC005517>.
- Carignan, M.O., Carreto, J.I., 2013. Characterization of mycosporine-serine-glycine methyl ester, a major mycosporine-like amino acid from dinoflagellates: a mass spectrometry study. *J. Phycol.* 49 (4), 680–688. <https://doi.org/10.1111/jpy.12076>.
- Das, S., Das, L., Giri, S., Chanda, A., Maity, S., Lotlikar, A.A., Hazra, S., 2017. Chromophoric dissolved organic matter (CDOM) variability over the continental shelf of the northern Bay of Bengal. *Oceanologia* 59 (3), 271–282. <https://doi.org/10.1016/j.oceano.2017.03.002>.
- Delgadillo-Hinojosa, F., Camacho-Ibar, V., Huerta-Díaz, M.A., Torres-Delgado, V., Pérez-Brunius, P., Lares, L., Marinone, S.G., Segovia, J.A., Peña-Manjarrez, J.L., García-Mendoza, E., Castro, R., 2015. Seasonal behavior of dissolved cadmium and Cd/PO4 ratio in Todos Santos Bay: a retention site of upwelled waters in the Baja California peninsula, Mexico. *Mar. Chem.* 168, 37–48. <https://doi.org/10.1016/j.marchem.2014.10.010>.
- Delgadillo-Hinojosa, F., Félix-Bermúdez, A., Torres Delgado, E.V., Durazo, R., Camacho-Ibar, V., Mejía, A., Ruíz, M.C., Linacre, L., 2020. Impacts of the 2014-2015 warm-water anomalies on nutrients, chlorophyll-a and hydrographic conditions in the coastal zone of northern Baja California. *J. Geophys. Res.* 125 <https://doi.org/10.1029/2020JC016473>.
- Del Vecchio, R., Blough, N.V., 2002. Photobleaching of chromophoric dissolved organic matter in natural waters: kinetics and modeling. *Mar. Chem.* 78 (4), 231–253. [https://doi.org/10.1016/S0304-4203\(02\)00036-1](https://doi.org/10.1016/S0304-4203(02)00036-1).
- Dittmar, T., Stubbins, A., 2014. 12.6-Dissolved organic matter in aquatic systems. *Treatise Geochem.* 2, 125–156. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-095975-7.01010-X>.
- Durazo, R., Castro, R., Miranda, L.E., Delgadillo-Hinojosa, F., Mejía-Trejo, A., 2017. Anomalous hydrographic conditions off the northwestern coast of the Baja California

- Península during 2013–2016. *Cienc. Mar.* 43 (2), 81–92. <https://doi.org/10.7773/cm.v43i2.2754>.
- Espinosa-Carreón, T.L., Gaxiola-Castro, G., Robles-Pacheco, J.M., Nájera-Martínez, S., 2001. Temperatura, salinidad, nutrientes y clorofila a en aguas costeras de la Ensenada Sur de California. *Cienc. Mar.* 27, 397–422. <https://doi.org/10.7773/cm.v27i3.490>.
- Favareto, L.R., Rudorff, N., Kampel, M., Frouin, R., Röttgers, R., Doxaran, D., Murakami, H., Dupouy, C., 2018. Bio-Optical characterization and ocean colour inversion in the Eastern lagoon of New Caledonia, South Tropical Pacific. *Remote Sens.* 10 (7), 1043. <https://doi.org/10.3390/rs10071043>.
- Flores-Vidal, X., González-Montes, S., Zertuche-Chanes, R., Rodríguez-Padilla, I., Martí, C.L., Imberger, J., Mejía-Trejo, A., Durazo-Arvizu, R., Navarro-Olache, L., 2018. Three-dimensional exchange flows in a semi-enclosed bay: numerical simulations and high frequency radar observations. *Estuar., Coast. Shelf Sci.* 210, 26–35. <https://doi.org/10.1016/j.ecss.2018.05.027>.
- García-Mendoza, E., Rivas, D., Olivares-Ortiz, A., Almazán-Becerril, A., Castañeda-Vega, C., Peña-Manjarrez, J.L., 2009. A toxic *Pseudo-nitzschia* bloom in Todos Santos Bay, northwestern Baja California, Mexico. *Harmful Algae* 8 (3), 493–503. <https://doi.org/10.1016/j.hal.2008.10.002>.
- Gonzalez-Silvera, A., Santamaria-del-Angel, E., Millán-Núñez, R., 2006. Spatial and temporal variability of the Brazil-Malvinas Confluence and the La Plata Plume as seen by SeaWiFS and AVHRR imagery. *J. Geophys. Res.* 111 (C6). <https://doi.org/10.1029/2004JC002745>.
- Groom, S., Sathyendranath, S., Ban, Y., Bernard, S., Brewin, R., Brotas, V., Brockmann, C., Prakash, C., Jong-kuk, C., Chuprin, A., Ciavatta, S., Cipollini, P., Donlon, C., Franz, B., He, X., Hirata, T., Jackson, T., Kampel, M., Krasemann, H., Lavender, S., Pardo-Martinez, S., Mélin, F., Platt, T., Santoleri, R., Skakala, J., Schaeffer, B., Smith, M., Steinmetz, F., Valente, A., Wang, M., 2019. Satellite ocean colour: current status and future perspective. *Front. Mar. Sci.* 6, 485. <https://doi.org/10.3389/fmars.2019.00485>.
- Grunert, B.K., Mouw, C.B., Ciochetto, A.B., 2018. Characterizing CDOM spectral variability across diverse regions and spectral ranges. *Glob. Biogeochem. Cycles* 32 (1), 57–77. <https://doi.org/10.1002/2017GB005756>.
- Gutiérrez-Mejía, E., Lares, M.L., Huerta-Díaz, M.A., Delgado-Hinojosa, F., 2016. Cadmium and phosphate variability during algal blooms of the dinoflagellate *Lingulodinium polyedrum* in Todos Santos Bay, Baja California, Mexico. *Sci. Total Environ.* 541, 865–876. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.09.081>.
- Hallegraeff, G., Enevoldsen, H., Zingone, A., 2021. Global harmful algal bloom status reporting. *Harmful Algae* 102, 101992. <https://doi.org/10.1016/j.hal.2021.101992>.
- IOCCG. (2000). Remote Sensing of Ocean Colour in Coastal and Other Optically-Complex Waters. S. Sathyendranath (eds.). IOCCG Report Series No. 3, Dartmouth, Canada. <https://doi.org/10.25607/OBP-95>.
- IOCCG. (2021). Observation of Harmful Algal Blooms with Ocean Colour Radiometry. Bernard, S., Kudela, R., Robertson Lain, L. and Pitcher, G.C. (eds.), IOCCG Report Series No. 20, Dartmouth, Canada. <https://doi.org/10.25607/OBP-1042>.
- Jeffrey, S.W., Mantoura, R.F.C., Wright, S.W., 1997. *Phytoplankton Pigments in Oceanography: Guidelines and Modern Methods*. UNESCO Publishing, Paris, p. 661.
- Kahru, M., Mitchell, B.G., 1998. Spectral reflectance and absorption of a massive red tide off southern California. *J. Geophys. Res.: Oceans* 103 (C10), 21601–21609. <https://doi.org/10.1029/98JC01945>.
- Kahru, M., Anderson, C., Barton, A.D., Carter, M.L., Catlett, D., Send, U., Sosik, H.M., Weiss, E.L., Mitchell, B.G., 2021. Satellite detection of dinoflagellate blooms off California by UV reflectance ratios. *Elem. Sci. Anth* 9 (1), 00157. <https://doi.org/10.1525/elementa.2020.00157>.
- Kishino, M., Takahashi, M., Okami, N., Ichimura, S., 1985. Estimation of the spectral absorption coefficients of phytoplankton in the sea. *Bull. Mar. Sci.* 37 (2), 634–642.
- Krug, L.A., Platt, T., Barbosa, A.B., 2018. Delineation of ocean surface provinces over a complex marine domain (off SW Iberia): An objective abiotic-based approach. *Reg. Stud. Mar. Sci.* 18, 80–96. <https://doi.org/10.1016/j.rsm.2018.01.003>.
- Kurczyn, J.A., Pérez-Brunius, P., López, M., Candela, J., Delgado-Hinojosa, F., García-Mendoza, E., 2019. Water masses and ocean currents over the continental slope off northern Baja California. *J. Geophys. Res.: Oceans* 124 (4), 2803–2823. <https://doi.org/10.1029/2018JC013962>.
- Lee, Z.P., Carder, K.L., Arnone, R.A., 2002. Deriving inherent optical properties from water color: a multiband quasi-analytical algorithm for optically deep waters. *Appl. Opt.* 41, 5755–5772. <https://doi.org/10.1364/AO.41.005755>.
- Lubac, B., Loisel, H., Guiselin, N., Astoreca, R., Artigas, L.F., Mériaux, X., 2008. Hyperspectral versus multispectral remote sensing approach to detect phytoplankton blooms in coastal waters: application to a *Phaeocystis* bloom. *J. Geophys. Res.* (113), 1–17. <https://doi.org/10.1029/2007JC005413>.
- Luz, L.F., Noernberg, M.A., 2022. Spectral changing during a massive bloom event of *Dinophysis cf. acuminata* in south Brazil. *Reg. Stud. Mar. Sci.* 56, 102681. <https://doi.org/10.1016/j.rsm.2022.102681>.
- Mannino, A., Novak, M.G., Nelson, N.B., Belz, M., Berthon, J.-F., Blough, N.V., Boss, E., Bricaud, A., Chaves, J., Del Castillo, C., Del Vecchio, R., D'Sa, E.J., Freeman, S., Matsuoka, A., Miller, R.L., Neeley, A.R., Röttgers, R., Tzortziou, M., Werdell, P.J., 2019. Measurement protocol of absorption by chromophoric dissolved organic matter (CDOM) and other dissolved materials. In: Mannino, A., Novak, M.G. (Eds.), *Inherent Optical Property Measurements and Protocols: Absorption Coefficient*. IOCCG Ocean Optics and Biogeochemistry Protocols for Satellite Ocean Colour Sensor Validation. IOCCG, Dartmouth, NS, Canada.
- Maritorea, S., Siegel, D.A., Peterson, A.R., 2002. Optimization of a semianalytical ocean color model for global-scale applications. *Appl. Opt.* 41 (15), 2705–2714. <https://doi.org/10.1364/AO.41.002705>.
- Martias, C., Tedetti, M., Lantoiné, F., Jamet, L., Dupouy, C., 2018. Characterization and sources of colored dissolved organic matter in a coral reef ecosystem subject to ultramafic erosion pressure (New Caledonia, Southwest Pacific). *Sci. Total Environ.* 616, 438–452. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.10.261>.
- McClain, C.R., 2009. A decade of satellite ocean color observations. *Ann. Rev. Mar. Sci.* 1, 19–42. <https://doi.org/10.1146/annurev.marine.010908.163650>.
- Medina-Elizalde, J., García-Mendoza, E., Ruiz-de la Torre, M.C., Peña-Manjarrez, J.L., Sánchez-Bravo, Y., Paredes-Banda, P., 2016. Florecimientos algales nocivos y su impacto ecológico, económico ya la salud pública en la costa occidental de la península de Baja California. *Florencia algales nocivos en México*. CICESE, Ensenada.
- Mitchell, B.G., Kahru, M., Wieland, J., Wieland, J., Stramska, M. (2003). Determination of spectral absorption coefficients of particles, dissolved material and phytoplankton for discrete water samples. J.L. Mueller, G.S. Fargion, C.R. McClain (Eds.), *Ocean Opt. Protoc. Satell. Ocean Color Sens. Valid.*, Revis. 4, Volume IV, pp. 39–60.
- Nelson, N.B., Siegel, D.A., 2002. Chromophoric DOM in the open ocean. In: Hansell, D.A., Carlson, C.A. (Eds.), *Biogeochemistry of Marine Dissolved Organic Matter*. Academic Press, San Diego, California, pp. 547–578.
- Nima, C., Frette, Ø., Hamre, B., Stamnes, J.J., Chen, Y.C., Sørensen, K., Norli, M., Lu, D., Xing, Q., Muyimbwa, D., Ssenyonga, T., Stamnes, K.H., Erga, S.R., 2019. CDOM absorption properties of natural water bodies along extreme environmental gradients. *Water* 11 (10), 1988. <https://doi.org/10.3390/w11101988>.
- O'Reilly, J.E., Werdell, P.J., 2019. Chlorophyll algorithms for ocean color sensors – OC4, OC5 & OC6. *Remote Sens. Environ.* 229, 32–47. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2019.04.021>.
- Peña-Manjarrez, J.L., Castro, G.G., Escamilla, J.H., Cepeda, E.O., 2001. Quistes de *Lingulodinium polyedrum*, productor de mareas rojas en la Bahía de Todos Santos (invierno-primavera, 2000). *Cienc. Mar.* 27 (4), 543–558. <https://doi.org/10.7773/cm.v27i4.501>.
- Peng, J., Guo, F., Liu, S., Fang, H., Xu, Z., Wang, T., 2023. Recent advances and future prospects of mycosporine-like amino acids. *Molecules* 28 (14), 5588. <https://doi.org/10.3390/molecules28145588>.
- Ramírez-Altamirano, Y.L., González-Silvera, A., López-Calderón, J., Santamaria-del-Angel, E., 2023. Evaluation of the taxonomic composition of phytoplankton using microscopy and CHEMTAX in Todos Santos Bay (Baja California, México) during 2017–2018. *Lat. Am. J. Aquat. Res.* 51 (2), 218–237. <https://doi.org/10.3856/vol51-issue2-fulltext-2988>.
- Reed, D.C., Carlson, C.A., Halewood, E.R., Nelson, J.C., Harrer, S.L., Rassweiler, A., Miller, R.J., 2015. Patterns and controls of reef-scale production of dissolved organic carbon by giant kelp *Macrocystis pyrifera*. *Limnol. Oceanogr.* 60 (6), 1996–2008. <https://doi.org/10.1002/lno.10154>.
- Roesler, C., Stramski, D., D'Sa, E.J., Röttgers, R., Reynolds, R.A., 2018. Spectrophotometric measurements of particulate absorption using filter pads. In: Neeley, A.R., Mannino, A. (Eds.), *Inherent Optical Property Measurements and Protocols: Absorption Coefficient*. IOCCG Ocean Optics and Biogeochemistry Protocols for Satellite Ocean Colour Sensor Validation. IOCCG, Dartmouth, NS, Canada.
- Siegel, D.A., Maritorea, S., Nelson, N.B., Hansell, D.A., Lorenzi-Kayser, M., 2002. Global distribution and dynamics of colored dissolved and detrital organic materials. *J. Geophys. Res.: Oceans* 107 (C12), 21–21. <https://doi.org/10.1029/2001JC000965>.
- Tanahara, S., Canino-Herrera, S.R., Durazo, R., Félix-Bermúdez, A., Vivanco-Aranda, M., Morales-Estrada, E., del Carmen Lugo-Ibarra, K., 2021. Spatial and temporal variations in water quality of Todos Santos Bay, northwestern Baja California, Mexico. *Mar. Pollut. Bull.* 173, 113148. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2021.113148>.
- Tomas, C., 1997. *Identifying marine phytoplankton*. Academic Press, New York.
- Thomas, C., 2012. The HPLC method. In: Hooker, S.B., Clementson, L., Thomas, C.S. (Eds.), *The Fifth SeaWiFS HPLC analysis round-robin experiment (SeaHARRE-5)*. NASA Technical Memorandum, Houston, pp. 63–72.
- Tartarotti, B., Sommaruga, R., 2006. Seasonal and ontogenetic changes of mycosporine-like amino acids in planktonic organisms from an alpine lake. *Limnol. Oceanogr.* 51 (3), 1530–1541. <https://doi.org/10.4319/lo.2006.51.3.1530>.
- Utermöhl, H. (1958). Vervollkmmung der quantitativen Phytoplankton-Methodik. Mitteilungen der Internationalen Vereinigung für heorestische und Angewandte Limnologie, 1: 1–38. <https://doi.org/10.4319/lo.2006.51.3.1530>.
- Van-Heukelem, L., Thomas, C.S., 2001. Computer assisted high-performance liquid chromatography method development with applications to the isolation and analysis of phytoplankton pigments. *J. Chromatogr.* 910, 31–49. [https://doi.org/10.1016/S0378-4347\(00\)00603-4](https://doi.org/10.1016/S0378-4347(00)00603-4).
- van Oostende, M., Hieronymi, M., Krasemann, H., Baschek, B., 2023. Global ocean colour trends in biogeochemical provinces. *Front. Mar. Sci.* 10, 1052166. <https://doi.org/10.3389/fmars.2023.1052166>.
- Vernet, M., Whitehead, K., 1996. Release of ultraviolet absorbing compounds by the red-tide dinoflagellate *Lingulodinium polyedra*. *Mar. Biol.* 127, 35–44.
- Weigel, B.L., Pfister, C.A., 2021. The dynamics and stoichiometry of dissolved organic carbon release by kelp. *Ecology* 102 (2), e03221. <https://doi.org/10.1002/ecy.3221>.
- Werdell, P.J., Bailey, S.W., Franz, B.A., Morel, A., McClain, C.R., 2007. On-orbit vicarious calibration of ocean color sensors using an ocean surface reflectance model. *Appl. Opt.* 46 (23), 5649–5666. <https://doi.org/10.1364/AO.46.005649>.
- Werdell, P.J., Franz, B.A., Bailey, S.W., Feldman, G.C., Boss, E., Brando, V.E., Mangin, A., 2013. Generalized ocean color inversion model for retrieving marine inherent optical properties. *Appl. Opt.* 52 (10), 2019–2037. <https://doi.org/10.1364/AO.52.002019>.
- Werdell, P.J., McKinna, L.I., Boss, E., Ackleson, S.G., Craig, S.E., Gregg, W.W., Lee, Z., Maritorea, S., Roesler, C.S., Rousseaux, C.S., Stramski, D., Sullivan, J.M., Twardowski, M.S., Tzortziou, M., Zhang, X., 2018. An overview of approaches and challenges for retrieving marine inherent optical properties from ocean color remote

- sensing. ISSN 0079-6611 Prog. Oceanogr. 160, 186–212. <https://doi.org/10.1016/j.pocean.2018.01.001>.
- Weiss, E.L., Cape, M.R., Pan, B.J., Vernet, M., James, C.C., Smyth, T.J., Ha, S.Y., Iriarte, J. L., Mitchell, B.G., 2022. The distribution of mycosporine-like amino acids in phytoplankton across a Southern Ocean transect. Front. Mar. Sci. 9, 1022957. <https://doi.org/10.3389/fmars.2022.1022957>.
- Whitehead, K., Vernet, M., 2000. Influence of mycosporine-like amino acids (MAAs) on UV absorption by particulate and dissolved organic matter in La Jolla Bay. Limnol. Oceanogr. 45 (8), 1788–1796. <https://doi.org/10.4319/lo.2000.45.8.1788>.
- Wilson, C., Chen, C., Clark, C., Fanning, P., Forget, M.H., Friedland, K., Howell, E., Chuanmin, H., Hyde, K., Kobayashi, D., Longhurst, A., Monger, B., Morales, J., Pendleton, D., Pershing, A., Paltt, T., Polovino, J., Record, N., Sathyendranath, S., Sherman, K., Woodard, L. (2009). Remote sensing application to marine resource management. Cap. 4. En: IOCCG Report No. 8. Remote sensing in fisheries and aquaculture. Forget, M.H., Stuart, V. y Platt, T. (eds.).
- Zar, J.H., 1999. Biostatistical Analysis, fourth ed. Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, p. 663.
- Zheng, B., Lucas, A.J., Franks, P.J.S., Schloser, T.L., Anderson, C.R., Send, U., Davis, K., Barton, A., Sosik, H.M., 2023. Dinoflagellate vertical migration fuels an intense red tide. Proc. Natl. Acad. Sci.; Earth Atmos. Planet. Sci. 120 (36), e2304590120 <https://doi.org/10.1073/pnas.2304590120>.

5. Capítulo 2. Evaluación del Desempeño de Imágenes Satelitales y Algoritmos de Color del Océano en una bahía costera del Pacífico Nororiental: Análisis Comparativo del OLCI (Sentinel-3A) y VIIRS (SNPP y JPSS1).

A ser sometido a la revista *Remote Sensing* (MDPI; <https://www.mdpi.com/journal/remotesensing>)

5.1 Resumen

En este estudio se evaluó el desempeño de dos algoritmos globales y dos regionales para estimar la reflectancia marina ($R_{rs}(\lambda)$) y la concentración de clorofila *a* (Chl*a*) en la Bahía de Todos Santos (Baja California, México), una zona costera ópticamente compleja. Para esto se utilizaron datos derivados de los sensores OLCI (satélite Sentinel 3A) y VIIRS (satélites SNPP y JPSS1) y se compararon a mediciones realizadas *in situ* recolectadas entre 2021 y 2023. A su vez, se evaluó el desempeño de algoritmos globales (OC3V y OC4) y regionales (AG y AGC) utilizando mediciones *in situ* de la $R_{rs}(\lambda)$. Los resultados remarcaron que la Chl*a* derivada de los sensores OLCI y VIIRS sobreestiman la Chl*a* *in situ* (88% a 445%), asociado a una subestimación de la $R_{rs}(\lambda)$ la cual, a su vez, sugiere incertidumbres en las correcciones atmosféricas. Sin embargo, al usar las $R_{rs}(\lambda)$ medidas *in situ*, se pudo determinar que los algoritmos mejoran su precisión y disminuyen su porcentaje de sobreestimación. Entre estos, el algoritmo global OC3V presentó un porcentaje de sobreestimación de 82%, mientras el regional AGC de 52%. Estos hallazgos resaltan la importancia de adaptar los algoritmos a condiciones locales y mejorar las estrategias de corrección atmosférica para optimizar la estimación de Chl*a* en regiones costeras. A pesar del mejor desempeño del algoritmo regional, se recomienda trabajar en su optimización para adecuarlo a las condiciones ópticas de las aguas de la Bahía de Todos Santos.

Palabras clave: Color del océano, clorofila *a*; reflectancia del sensor remoto; validación; OLCI; VIIRS; OC4; OC3V; aguas costeras.

5.2 Abstract

In this study, the performance of two global and two regional algorithms was evaluated for estimating marine reflectance ($R_{rs}(\lambda)$) and chlorophyll-a concentration (Chla) in Todos Santos Bay (Baja California, Mexico), an optically complex coastal region. For this purpose, data derived from the OLCI sensor (Sentinel-3A satellite) and VIIRS sensors (SNPP and JPSS1 satellites) were used and compared against *in situ* measurements collected between 2021 and 2023. Additionally, the performance of global (OC3V and OC4) and regional (AG and AGC) algorithms was assessed using *in situ* $R_{rs}(\lambda)$ measurements. The results indicated that Chla estimates derived from the OLCI and VIIRS sensors overestimated *in situ* Chla concentrations by 88% to 445%, a discrepancy associated with an underestimation of $R_{rs}(\lambda)$, which in turn suggests uncertainties in atmospheric correction procedures. However, when using *in situ* $R_{rs}(\lambda)$ measurements, algorithm performance improved, with a noticeable reduction in Chla overestimation. Among the evaluated algorithms, the global OC3V algorithm exhibited an overestimation of 82%, while the regional AGC algorithm showed a reduced overestimation of 52%. These findings underscore the importance of adapting algorithms to local optical conditions and improving atmospheric correction strategies to optimize Chla estimation in coastal regions. Despite the better performance of the regional algorithm, further refinement is recommended to enhance its suitability for the optical characteristics of the waters in Todos Santos Bay.

Keywords: Ocean color; Chlorophyll-a; remote sensing reflectance; algorithm validation; OLCI; VIIRS; OC4; OC3V; coastal waters

5.3 Introducción

El monitoreo de la variabilidad en zonas costeras es fundamental para comprender los cambios en los ecosistemas marinos, la calidad del agua y los impactos de la actividad humana (Salamanca, 2024). Estas áreas son especialmente sensibles a perturbaciones como la contaminación, la sobrepesca y los efectos del cambio climático (Villanueva-Fragoso et al., 2010), lo que hace que su estudio sea crucial para la gestión y conservación de los recursos marinos. En este contexto, los sensores satelitales de color del océano desempeñan un papel esencial, al proporcionar productos espectrales que permiten estimar variables biofísicas clave (McCarthy et al., 2017). Estos datos son especialmente útiles para caracterizar el fitoplancton marino, organismo base de la red trófica y actor central en el ciclo biogeoquímico del carbono (Calbet y Landry, 2004). Además, el fitoplancton actúa como un indicador sensible del estado ecológico y de la productividad biológica en ambientes costeros (van Oostende et al., 2023). Entre las variables derivadas de estos sensores, la concentración de clorofila *a* (Chl*a*) es la más ampliamente utilizada, al representar un indicador confiable de la biomasa fitoplanctónica (Jeffrey et al., 1997).

La estimación de la concentración de Chl*a* se ha realizado históricamente mediante dos enfoques principales: algoritmos empíricos y algoritmos semi-analíticos (Werdell et al., 2023). Los algoritmos como los de la generación OCx (por ejemplo, OC3 y OC4) se basan en relaciones empíricas entre datos de concentración de Chl*a* y de reflectancias del sensor remoto ($R_{rs}(\lambda)$) medidas *in situ* (O'Reilly y Werdell, 2019). En particular la $R_{rs}(\lambda)$ se define como el cociente entre la radiancia superficial emergente del agua (water-leaving radiance o $L_w(\lambda)$) y la irradiancia descendente en la superficie ($E_d(\lambda)$). Esta variable representa la fracción de luz solar reflejada por el agua hacia el sensor, medida en distintas

longitudes de onda dentro del espectro visible (usualmente entre 400 y 700 nm). Los algoritmos OCx utilizan razones espectrales logarítmicas de $R_{rs}(\lambda)$, típicamente entre bandas en el azul y el verde (blue:green), para estimar la concentración de Chla mediante una expresión polinómica ajustada a datos empíricos (o medidos *in situ*). La forma general de estos algoritmos se expresa como una relación polinómica de cuarto orden (Werdell et al., 2023):

$$\log_{10}[\text{Chla}] = a_0 + a_1 \cdot R + a_2 \cdot R^2 + a_3 \cdot R^3 + a_4 \cdot R^4 \quad (1)$$

donde $R = \log_{10}(R_{rs}(\lambda_{\text{blue}})/R_{rs}(\lambda_{\text{green}}))$, a = son los coeficientes del polinomio.

La razón $R_{rs}(\lambda_{\text{blue}})/R_{rs}(\lambda_{\text{green}})$, conocida como razón máxima de bandas (Maximum Band Ratio, MBR), corresponde al valor máximo obtenido entre varias combinaciones de bandas en el intervalo azul-verde, cuyas longitudes específicas dependen del sensor satelital utilizado. Los algoritmos OC3 y OC4 se diferencian en el número de bandas empleadas para calcular dicha razón (tres en OC3, cuatro en OC4), lo que permite adaptar el algoritmo a las características espectrales del sensor y, en algunos casos, del cuerpo de agua.

La aplicación de estos algoritmos ha mostrado niveles de precisión relativamente bajos (10 a 30% de incertidumbre) en aguas oceánicas abiertas y oligotróficas, donde el fitoplancton es el principal componente ópticamente activo que modula la reflectancia del agua (IOCCG, 2000; Antoine, 2010). Sin embargo, en zonas costeras, la incertidumbre asociada a la estimación de Chla se incrementa notablemente debido a la influencia de múltiples factores naturales y antrópicos (turismo, descargas, pesca, infraestructura portuaria, acuicultura) (IOCCG, 2019). Estos entornos introducen componentes

ópticamente activos adicionales, como la materia orgánica disuelta cromofórica (CDOM) y las partículas no algales (NAP), que compiten con el fitoplancton en la absorción y dispersión de luz, alterando la relación entre $R_{rs}(\lambda)$ y $Chl a$ (Sathyendranath et al., 1989; Dierssen, 2010; Lavigne et al., 2021). Por estas razones, y dada la importancia monitorear la variabilidad de la $Chl a$ en zonas costeras, es fundamental evaluar el desempeño de los algoritmos globales en contextos regionales. Esto permite estimar su nivel de incertidumbre y, en caso necesario, proponer ajustes o desarrollar algoritmos específicos. Así mismo, la validación continua de modelos globales y regionales con bases de datos representativas de distintas condiciones bio-ópticas es esencial para mejorar la precisión y aplicabilidad de los productos satelitales en ambientes costeros.

Las aguas costeras del Pacífico Norte Oriental han sido escasamente estudiadas en lo que respecta a la validación de productos satelitales como la $R_{rs}(\lambda)$ y la concentración de $Chl a$. Esto especialmente para aquellos datos generados por sensores de reciente generación como son el OLCI (Ocean and Land Colour Instrument, Sentinel-3, Agencia Espacial Europea - ESA) y el VIIRS (Visible Infrared Imaging Radiometer Suite, a bordo de los satélites SNPP y JPSS1, operados por NASA y NOAA). Por ejemplo, Giannini et al. (2021) evaluaron las estimaciones de $Chl a$ derivadas del sensor OLCI, utilizando tanto un algoritmo empírico de la familia OCx (OC4) como uno basado en redes neuronales (NN), en aguas frente a las costas de Canadá. Sus resultados indicaron que el algoritmo NN produjo estimaciones más precisas de $Chl a$ en ambientes costeros, mientras que el OC4 mostró un desempeño deficiente en esas condiciones. En esa misma región, Vishnu y Costa (2023) confirmaron que el algoritmo OC4 mejora su desempeño en aguas más alejadas de la costa y con bajas concentraciones de $Chl a$ ($< 0.6 \text{ mg m}^{-3}$), y destacaron

también la influencia crítica del tipo de corrección atmosférica aplicada sobre la precisión de los productos.

En aguas frente a California, Kahru et al. (2014) evaluaron la *Chla* derivada del sensor VIIRS-SNPP, el cual utiliza un algoritmo de tres bandas (OC3V). Observaron que su desempeño era óptimo a bajas concentraciones de *Chla* ($< 1 \text{ mg m}^{-3}$), pero decrecía conforme aumentaba la biomasa fitoplanctónica.

Finalmente, Alvarado-Graef et al. (2024) realizaron un estudio frente a las costas de la península de Baja California (México), y encontraron que los algoritmos OCx mantienen un desempeño aceptable cuando las concentraciones de *Chla* son bajas ($< 1 \text{ mg m}^{-3}$). A partir de estos resultados, dividieron su área de estudio en tres regiones bio-ópticas y propusieron algoritmos que mejoraron la precisión dentro de cada región.

La Bahía de Todos Santos (BTS) es una bahía costera ubicada al norte de la península de Baja California, en las inmediaciones de Ensenada, México. Se le reconoce por su importancia económica, sustentada principalmente en actividades pesqueras y acuícolas (Tanahara et al., 2021), así como por su importancia ecológica, al albergar una alta diversidad de especies marinas y formar parte de rutas migratorias clave para peces, mamíferos marinos y aves (Page et al., 1994).

Recientemente, esta región ha sido caracterizada como un sistema ópticamente complejo, dominado por la absorción de luz debida al fitoplancton y la materia orgánica disuelta cromofórica (CDOM) (Larios-Muñiz et al., 2024). Estas condiciones pueden afectar significativamente la precisión de los algoritmos ópticos utilizados para estimar la concentración de *Chla*, espacialmente aquellos diseñados para ambientes oceánicos abiertos. Sin embargo, hasta la fecha no se cuenta con evaluaciones específicas que validen esta hipótesis en la BTS.

En este contexto, el presente estudio tuvo como objetivo evaluar el desempeño de las estimaciones satelitales de *Chla* derivadas de los sensores OLCI, VIIRS-SNPP y VIIRS-JPSS1. Así mismo, se analizó la precisión de algoritmos globales (familia OCx) y regionales desarrollados por Alvarado-Graef et al., (2024), con el fin de determinar su aplicabilidad en ambientes costeros ópticamente complejos.

La relevancia de este trabajo radica en su contribución al entendimiento de los factores que condicionan la precisión de las estimaciones satelitales de *Chla* en zonas costeras. Estas regiones, caracterizadas por propiedades ópticas complejas debido a la presencia de CDOM y NAP, representan desafíos significativos para la aplicación de algoritmos diseñados principalmente para aguas oceánicas abiertas. En este contexto, los resultados del presente estudio son fundamentales no solo para mejorar la interpretación y el uso de datos de sensores remotos en la BTS, sino también para aportar evidencia útil en el desarrollo y validación de algoritmos más robustos y adaptados a condiciones regionales. Asimismo, los hallazgos obtenidos pueden ser extrapolados a otras regiones costeras con características ópticas similares, lo que fortalece así el monitoreo satelital de la *Chla* en diversos contextos geográficos y contribuye a una gestión ambiental más informada.

5.4 Metodología

5.4.1 Área de estudio

La Bahía de Todos Santos se encuentra localizada en la costa noroeste de Baja California ($31^{\circ}40'$ - $31^{\circ}56'$ N y $116^{\circ}36'$ - $116^{\circ}50'$ O), aproximadamente 100 km al sur de la frontera entre México y Estados Unidos (Kurczyn et al., 2019). Tiene un área de ~ 260 km² (Fig. 1), con una batimetría que exhibe una pendiente suave con profundidades de

hasta 50 m, y un cañón submarino de más de 400 m de profundidad que está presente en el área sur de la bahía (Tanahara et al., 2021). Las características fisicoquímicas de la bahía están estrechamente relacionadas con el sistema de la Corriente de California, que transporta agua subártica hacia el Ecuador con bajas temperaturas, baja salinidad y altas concentraciones de oxígeno disuelto (Durazo et al., 2017). A su vez, la bahía está caracterizada como un cuerpo de agua ópticamente complejo donde los componentes con mayor contribución a la absorción de luz son el fitoplancton y el CDOM (Larios-Muñiz et al., 2024).

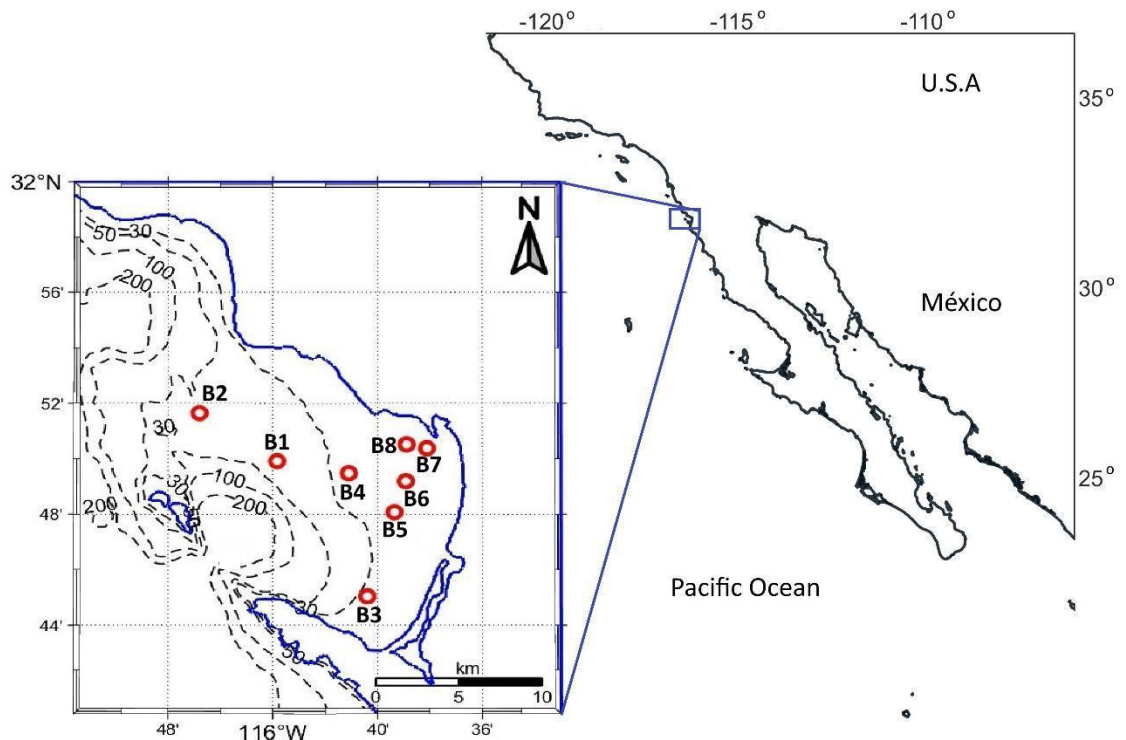


Figura 1. Bahía de Todos Santos, área de estudio y ubicación de las estaciones de muestreo.

La metodología general aplicada para el desarrollo de este trabajo consta de tres etapas que se resumen en el diagrama presentado en la figura 2. En la primera etapa (Data sources) se describe la obtención de los datos. La segunda etapa consistió en la evaluación de los productos satelitales y la tercera etapa en la evaluación de algoritmos globales y regionales.

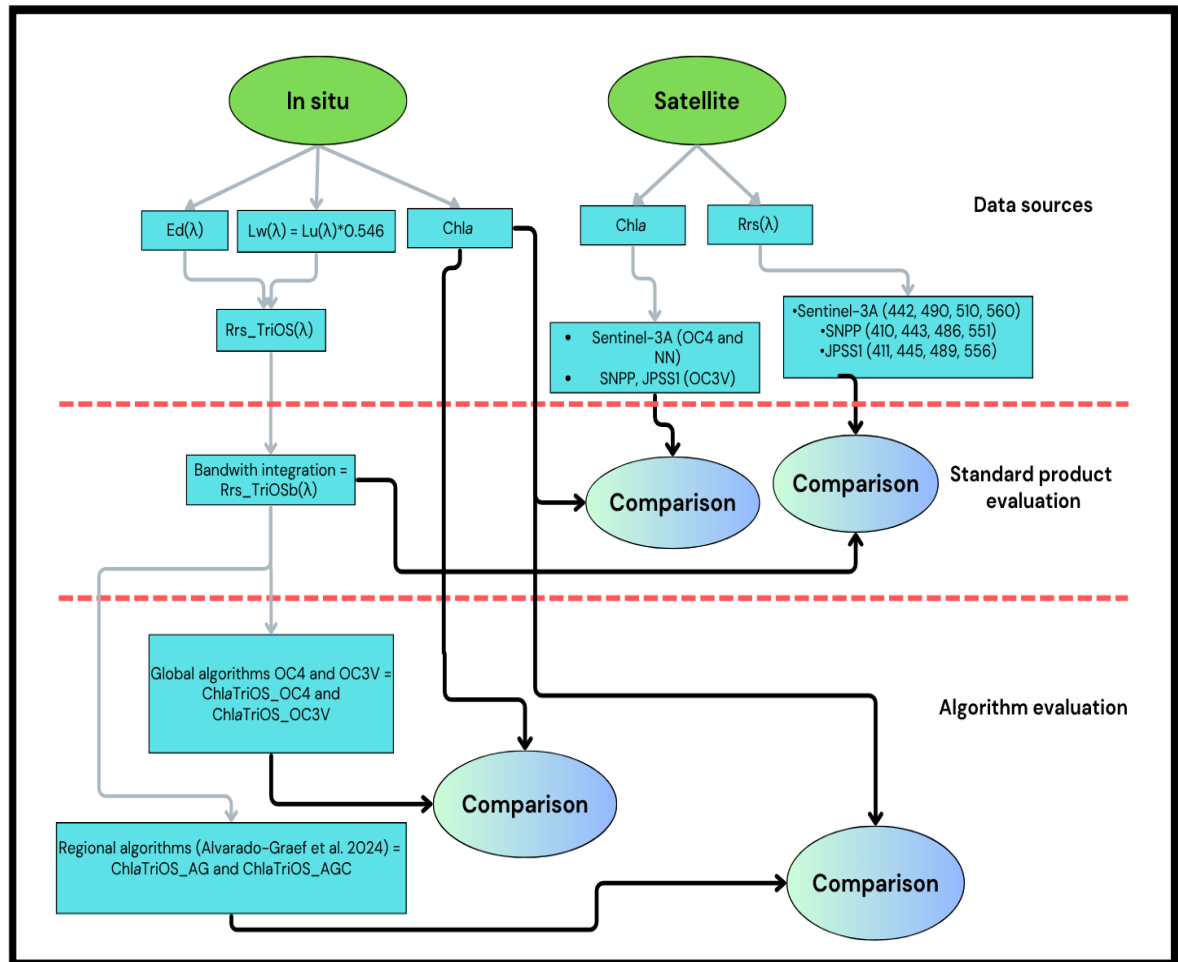


Figura 2. Diagrama de flujo ilustrando las diferentes etapas de análisis, desde la obtención de datos hasta la evaluación de los algoritmos para estimación de la concentración de Chl a.

5.4.2 Fuente de Datos

5.4.2.1 Campañas de Muestreo

Este estudio analiza datos obtenidos de ocho estaciones entre septiembre de 2021 y diciembre de 2023 (Fig. 1 y Tabla 1).

Tabla 1. Fechas de muestreo y código asociado a cada una de estas (Id) el cual será usado en las representaciones gráficas a lo largo del documento. Las fechas en negritas indican que un florecimiento estuvo presente durante el muestreo ($Chla > 6 \text{ mg m}^{-3}$).

Id	Fecha	Id	Fecha	Id	Fecha
D1-D3	9 de septiembre 2021	D19-D20	20 de enero 2022	D38-D41	20 de abril 2023
D4-D6	1 de octubre 2021	D21-D23	23 de marzo 2022	D42-D44	20 de junio 2023
D7-D9	28 de octubre 2021	D24-D26	24 de junio 2022	D45-D47	4 de septiembre 2023
D10-D11	12 de noviembre 2021	D27-D29	11 de agosto 2022	D48-D49	11 de diciembre 2023
D12-D13	3 de diciembre 2021	D30-D31	31 de agosto 2022		
D15	12 de diciembre 2021	D32-D34	26 de octubre 2022		
D16-D18	19 de diciembre 2021	D35-D37	30 de noviembre 2022		

Se colectaron muestras de agua superficial utilizando una botella Go-Flo (General Oceanics Inc., Miami, FL, USA). Posteriormente, entre 500 y 2000 mL del agua colectada se filtró a través de un sistema de filtración positivo utilizando filtros de fibra de vidrio (Whatman GF/F) de 25 mm (Whatman International Ltd., Little Chalfont, United Kingdom) con la finalidad de determinar la concentración de *Chla*. Los filtros fueron inmediatamente almacenados en un congelador (-80 °C) hasta su análisis. Más información sobre las características bio-ópticas del área de estudio se encuentran en Larios-Muñiz et al., (2024). Además, en cada estación se obtuvieron datos radiométricos mediante los sensores TriOS-RAMSES.

5.4.2.2 Mediciones Radiométricas

Las mediciones radiométricas se llevaron a cabo con dos radiómetros hiperspectrales TriOS-RAMSES, uno para medir la radiancia subsuperficial emergente $L_u(\lambda)$ (ARC-VIS 5121) y otro para la irradiancia descendente $E_d(\lambda)$ (ACC-VIS 5120), para el intervalo entre ~ 320 a 950 nm y con un ancho de banda de 3.3 nm (Fig. 3). Con la finalidad de mantener la calidad en las mediciones, la metodología de toma de datos y procesamiento de la información siguió las recomendaciones establecidas en el protocolo de Froidefond y Ouillon (2005). Para minimizar los efectos de sombreado y perturbaciones en el agua por la embarcación, el sensor que mide $L_u(\lambda)$ (~ 2 cm de profundidad) fue ajustado a un sistema de flotación (construido de filamento tipo PLA y forrado con fibra de vidrio) de dimensión $\sim 1\text{m}^2$ (Fig. 3b), el cual se conectó a una cuerda con boyas y se lanzó al mar por lo menos a 15 metros de distancia de la embarcación. Para la medición de $E_d(\lambda)$, el sensor fue posicionado verticalmente en la embarcación, de esta forma se aseguró que las mediciones fueran realizadas al cenit y sin interferencia de sombras (Fig. 3a). Las mediciones con cada sensor se hicieron de forma simultánea cada 10 segundos durante 10 - 20 minutos.

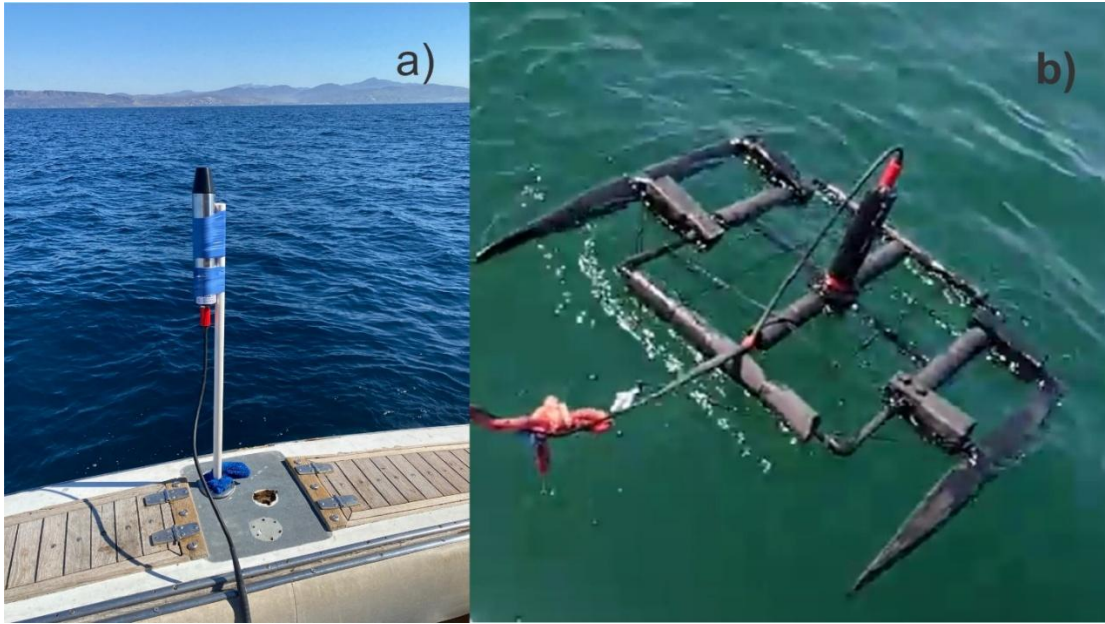


Figura 3. Fotografías de los sensores TriOS-RAMSES; (a) radiómetro exterior midiendo $E_u(\lambda)$ y (b) radiómetro sumergido ajustado al sistema de flotación midiendo $L_u(\lambda)$.

Los espectros resultantes pasaron por un proceso de filtrado, el cual removió aquellos cuyo ángulo de medición fuera mayor a 11° . La radiancia subsuperficial emergente $L_u(\lambda)$ se extrapoló a radiancia superficial emergente ($L_w(\lambda)$). Para esto se tomaron en cuenta el índice de refracción del agua (n), el cual considera las variaciones del ángulo sólido entre las mediciones tomadas en subsuperficie y aquellas que corresponden cuando la radiación emerge en superficie, y las transmisiones de la señal a través de la interfaz agua-aire expresada por el índice de refracción de Fresnel (t) tal y como se expresa en la siguiente ecuación (Froidefond y Ouillon, 2005):

$$L_w(\lambda) = t/n^2 * L_u(\lambda, 0^\circ) \quad (2)$$

Para lo anterior, se consideró un $n = 1.34$ para el agua de mar y un $t = 0.98$ para un sensor apuntando al nadir, por lo cual, t/n^2 da como resultado un valor de 0.546 (Froidefond y Ouillon, 2005).

Una vez obtenida $L_w(\lambda)$, se realizó el cálculo de la reflectancia *in situ* ($R_{rs_TriOS}(\lambda)$) mediante la razón $L_w(\lambda)/E_d(\lambda)$. Del total de espectros seleccionados, se determinó su promedio y desviación estándar para tener como resultado final un espectro de $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ para cada estación.

Se realizó un análisis de la variabilidad de los espectros $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ para evaluar las diferencias en su forma espectral, la cual se determinó normalizando $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ por el área bajo la curva (Luz y Noernberg, 2022):

$$R_{rs_TriOS_n}(\lambda) = \frac{R_{rs_TriOS}(\lambda)}{\int_{320}^{800} R_{rs_TriOS}(\lambda)d\lambda} \quad (3)$$

Posteriormente, con la finalidad de agrupar patrones similares en forma y magnitud de las curvas de $R_{rs_TriOS_n}(\lambda)$ (n=49), se realizó un análisis jerárquico de clúster no supervisado siguiendo los pasos que se describen a continuación:

- 1) Se calculó la matriz de distancia a partir de los valores del coeficiente de correlación de Pearson (r_P) entre las curvas de $R_{rs_TriOS_n}$, con base en la siguiente ecuación:

$$r_P = \text{Cov}_{xy} / \sqrt{\text{Var}_x * \text{Var}_y} \quad (4)$$

$$\text{Cov}_{x,y} = x = \frac{\sum_1^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n} \quad (5)$$

- 2) Se seleccionó el método de ligamiento por promedio para la formación de los nodos.
- 3) Se seleccionó una distancia de corte de 90% de similitud para definir las agrupaciones.

5.4.2.3 Concentración de Chla

La concentración de Chla se determinó por cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) utilizando el método de Van Heukelem y Thomas (2001) y modificado por Thomas (2012). Se utilizó un HPLC marca Agilent 1260 y los pigmentos fueron separados mediante una columna Zorbax Eclipse XDB C8 (4.6x150 mm, 3.5 de diámetro de poro) a una temperatura de 60°C, utilizando un sistema de tres solventes (A, B y C). El solvente A: Metanol al 70% y 0.028 M acetato de tetrabutilamonio (pH 6.5) al 30%; el solvente B: Metanol al 100% a un flujo de 1 mL/min y el solvente C: 100% acetona.

5.4.2.4 Imágenes de Satélite

Se descargaron datos del sensor OLCI (satélite Sentinel-3A), de <https://data.eumetsat.int/product/EO:EUM:DAT:0407?query=olci&s=extended>. Los datos del sensor VIIRS, el cual se encuentra a bordo de los satélites Suomi National Polar-Orbiting Partnership (SNPP, NASA) y Joint Polar-orbiting Satellite System-1 (JPSS1, NOAA), se descargaron de la página <https://search.earthdata.nasa.gov/search>. Las imágenes seleccionadas fueron aquellas que coincidieron con las fechas de muestreo (Tabla 1).

En el caso del OLCI se obtuvieron datos de nivel de procesamiento L2 “water full resolution” (300 m de resolución espacial). Los productos descargados incluyen datos de $R_{rs}(\lambda)$ a diferentes longitudes de onda (Tabla 2), y datos de concentración de Chla derivados de dos algoritmos disponibles: el “algal pigment concentration in clear waters” (OC4Me) (de aquí en adelante descrito como $Chla_{OC4}$) y el “algal pigment concentration in turbid waters” (Chl_NN) (de aquí en adelante descrito como $Chla_{NN}$) (<https://data.eumetsat.int/product/EO:EUM:DAT:0407?query=olci&s=extended>).

Tabla 2. Descripción de los sensores, bandas y ancho de bandas.

Sensor/Satélite	Bandas (nm)	Ancho de banda (nm)
OLCI/Sentinel-3A	442, 490, 510, 560	10
VIIRS/SNPP	410, 443, 486, 551	~15.1 – 20.4
VIIRS/JPSS1	411, 445, 489, 556	~17 – 19.1

En el caso de los sensores VIIRS, se obtuvieron datos de nivel de procesamiento L1 (750m de resolución espacial). Los productos descargados incluyen $R_{rs}(\lambda)$ a diferentes longitudes de onda (Tabla 2), los cuales se obtuvieron tomando en cuenta las banderas de calidad de las revisiones VIIRS-SNPP_R2022.0 y VIIRS-JPSS1_R2022.0. Los datos se procesaron hasta nivel L3 con los paquetes correspondientes contenidos en el software SeaDAS 9.0.1 para obtener imágenes de $R_{rs}(\lambda)$ y de $Chla$.

Se extrajeron los datos de $R_{rs}(\lambda)$ y $Chla$ del pixel correspondiente a la ubicación geográfica exacta de las estaciones de muestreo para luego elaborar diagramas de dispersión para comparar las observaciones *in situ* con las derivadas de los sensores.

La selección de estos dos sensores se basó en que (1) tienen pocos años desde su lanzamiento (2011 y 2016), lo que garantiza la calidad de los datos generados (Barnes et al., 2019), (2) los sensores VIIRS tienen una mejor resolución temporal (diaria) en comparación al OLCI (diaria a semanal) y, (3) el OLCI tiene una mejor resolución espacial (300 m) en comparación al VIIRS (750 m), lo que puede ser una ventaja en cuerpos costeros como la bahía.

5.4.3 Evaluación de los productos estándar

Para poder llevar a cabo la comparación entre las $R_{rs}(\lambda)$ derivadas de los sensores y la $R_{rs_TriOS}(\lambda)$, fue necesario considerar el ancho de banda asociado a cada sensor

(Tabla 2). Para esto, se realizó la integración de los datos $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ para el intervalo de longitudes de onda de cada banda (a partir de aquí nombrado como $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$).

Las comparaciones se realizaron siguiendo las recomendaciones de Seegers et al. (2018), las cuales incluyen una transformación logarítmica a los datos. Estos autores recomiendan escalas multiplicativas (como el \log_{10}) para variables que se distribuyen de forma no Gaussiana en la naturaleza, tales como la $Chla$ y la $R_{rs}(\lambda)$.

Los análisis estadísticos usados fueron los siguientes:

(a) Error Absoluto Medio (MAE por sus siglas en inglés): es utilizado como una medida de precisión ya que cuantifica la magnitud promedio del error entre los datos satelitales (y) y las medidas *in situ* (x) y es definido como:

$$MAE = 10^{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (|\log_{10}(y) - \log_{10}(x)|)}{n}\right)} \quad (6)$$

(b) BIAS (sesgo): estima el error sistemático entre los datos modelados y los observados e indica la tendencia del modelo a sobreestimar o subestimar la variable observada.

$$BIAS = 10^{\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log_{10}(y) - \log_{10}(x)\right)} \quad (7)$$

Ver que, dada la transformación logarítmica, un $BIAS=1$ representa el 100% de concordancia entre lo modelado y observado, $BIAS > 1$ indica sobreestimación, mientras $BIAS < 1$ indica subestimación. Por ejemplo, un $BIAS$ de 1.2 significa que los datos modelados son 1.2x veces (20%) más grandes que los observados mientras que un $BIAS$ de 0.80 significa que los datos modelados son 20% más bajos que los observados (Seegers et al., 2018).

(c) **% Wins (Residuos)**: Considera las diferencias entre los modelos y lo observado y provee una comparación por pares de la precisión de los algoritmos. Las comparaciones por pares se realizan secuencialmente: (1) se calculan las diferencias modelo-observación, (2) el modelo con los valores más bajos de esta diferencia es designado el ganador para cada observación, (3) el número de observaciones ganadas para cada modelo son tabuladas y (4) el modelo con el mayor número de observaciones ganadoras es designado como el modelo con el mejor desempeño.

5.4.4 Evaluación de los algoritmos

Los algoritmos fueron evaluados utilizando las máximas razones entre bandas (MBR) derivadas de las reflectancias *in situ* $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$. Estas razones se introdujeron en cada uno de los algoritmos, cuyos coeficientes y bandas varían según el sensor.

Se evaluaron cuatro algoritmos:

1. **OC4**: algoritmo estándar del sensor OLCI (Werdell et al., 2023), basado en un polinomio de cuarto orden:

$$\log_{10}(\text{Chla}) = 0.42540 - 3.21679R + 2.86907R^2 - 0.62628R^3 - 1.09333R^4 \quad (8)$$

$$R = \log_{10}[\max(R_{rs}(443, 490, 510))/R_{rs}(560)].$$

2. **OC3V**: algoritmo estándar para los sensores VIIRS (Wang et al., 2017). Se aplicaron coeficientes específicos según el satélite:

Para **VIIRS-SNPP**:

$$\log_{10}(\text{Chla}) = 0.23548 - 2.63001R + 1.65498R^2 + 0.16117R^3 - 1.37247R^4 \quad (9)$$

$$R = \log_{10}[\max(R_{rs}(443, 486, 551))/R_{rs}(555)].$$

Para **VIIRS-JPSS1**:

$$\log_{10}(\text{Chla}) = 0.28153 - 2.654721R + 1.30882R^2 + 1.31521R^3 - 2.08622R^4 \quad (10)$$

$$R = \log_{10} [\max(R_{rs}(445, 489, 556))/R_{rs}(555)]$$

3. **Regional AG:** (Alvarado-Graef et al., 2024): algoritmo de cuarto orden desarrollado para aguas frente a la península de Baja California:

$$\log_{10}(\text{Chla}) = 0.1746 - 1.9952R + 1.9992R^2 - 4.1958R^3 + 3.3837R^4 \quad (11)$$

$$R = \log_{10} [\max(R_{rs}(443,490))/R_{rs}(555)].$$

4. **Regional AGC:** (Alvarado-Graef et al., 2024) variante simplificada (primer orden) del modelo anterior, aplicado a un subconjunto costero de estaciones:

$$\log_{10}(\text{Chla}) = 0.2138 - 2.6481R \quad (12)$$

$$R = \log_{10}[\max(R_{rs}(443,490))/R_{rs}(555)].$$

Los valores de Chla estimados por cada algoritmo ($\text{Chla}_{\text{TriOS_OC4}}$, $\text{Chla}_{\text{TriOS_OC3V_SNPP}}$, $\text{Chla}_{\text{TriOS_OC3V_JPSS}}$, $\text{Chla}_{\text{TriOS_AG}}$, $\text{Chla}_{\text{TriOS_AGC}}$) fueron comparados con las mediciones *in situ* mediante los indicadores estadísticos previamente descritos (sección 5.4.3), con el objetivo de evaluar su desempeño en la Bahía de Todos Santos.

5.5 Resultados

5.5.1 Variabilidad radiométrica *in situ*

Los espectros $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ presentaron un amplio intervalo de variabilidad en magnitud y en forma (Fig. 4). El valor promedio máximo de la $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ se encontró a los 567 nm (Fig. 4a) asociada a la máxima desviación estándar. El coeficiente de variación (CV) se encontró entre el 20 y el 40% para las longitudes de onda debajo de los 400 nm, a los 560 nm se observó alrededor del 50% y para las longitudes de onda superiores a los 600 nm superó el 70%.

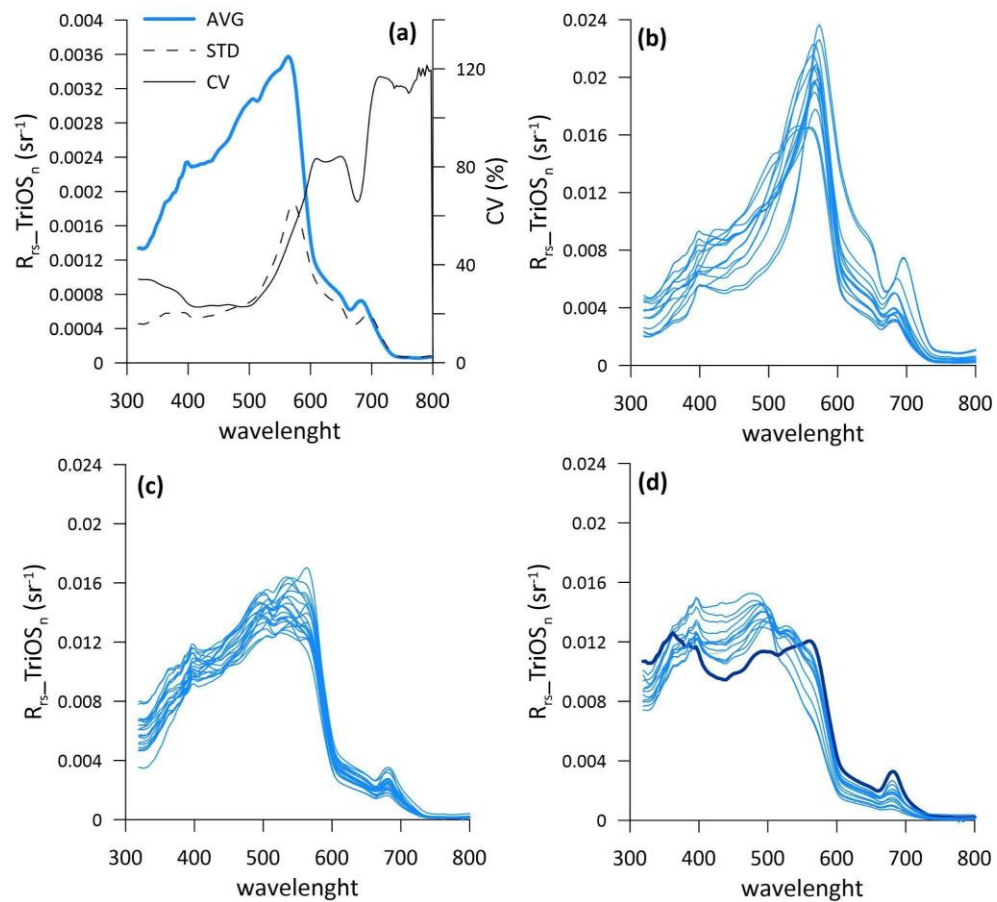


Figura 4. Porcentaje, desviación estándar y coeficiente de variación del total de espectros de $R_{rs_TriOS}(\lambda)$ contenidos en el set de datos (a). Los espectros $R_{rs_TriOS_n}(\lambda)$ fueron agrupados por el análisis jerárquico en: (b) C1; (c) C2 y (d) C3.

A su vez, el análisis de cluster mostró que los espectros de $R_{rs_TriOS_n}(\lambda)$ pueden ser clasificados en tres grupos de curvas (Fig. S1 y Tabla S1) con diferencias en su forma y magnitud (Fig. 4b-d). El primer grupo (C1, Fig. 4b) presentó espectros con la máxima R_{rs} entre los 560 y 570 nm. El segundo grupo (C2, Fig. 4c) se conformó de curvas cuya máxima $R_{rs}(\lambda)$ está entre los 550 y 560 nm y se marcan hombros alrededor de los 490 nm. Finalmente, el tercer grupo (C3, Fig. 4d) se conformó de curvas que presentaron dos picos máximos de $R_{rs}(\lambda)$ de similar magnitud, uno a los 400 nm y otro a los 490 nm. Finalmente, entre los espectros del grupo C3 se destacó una curva con una ligera diferencia en relación

a las demás (D38, línea azul oscuro en Fig. 4d), proveniente de la estación B2 (día 20 de abril del 2023), la cual se caracterizó por presentar un máximo sesgado hacia los 560 nm y un segundo a los 366 nm.

Se realizó una revisión de la distribución espacial de los grupos (Fig. 5a), y se observó que C1 se compone de datos provenientes, en su mayoría, de las estaciones de la zona interna de la bahía (B6 y cercanas a esta, Fig. 1), mientras que C3 lo componen en su mayoría datos de las estaciones de la zona externa (B1 y B2, Fig. 1). El C2 fue el grupo con el mayor número de datos, con proporciones similares de datos tanto de estaciones internas (B4 y B6) como externas (B1 y B2). Sin embargo, las diferencias entre los grupos son más marcadas cuando se analizaron las concentraciones de *Chl a* asociadas a cada uno (Fig. 5b). C1 se caracterizó por observaciones donde el 75% de los datos de *Chl a* son mayores a 4.25 mg m^{-3} , aunque se encontraron datos tan bajos como 0.3 mg m^{-3} y de hasta 17.1 mg m^{-3} . C2 se relacionó a concentraciones de *Chl a* donde el 75% de los datos fueron mayores a 1 mg m^{-3} , aunque se observaron valores tan bajos como 0.61 mg m^{-3} y máximos de hasta 1.6 mg m^{-3} (sin considerar los valores extremos). C3, por otro lado, se caracterizó por concentraciones aún más bajas (mediana de 0.97 mg m^{-3}) donde la mínima *Chl a* fue de 0.23 mg m^{-3} y la máxima (sin valores extremos) fue de 1.4 mg m^{-3} .

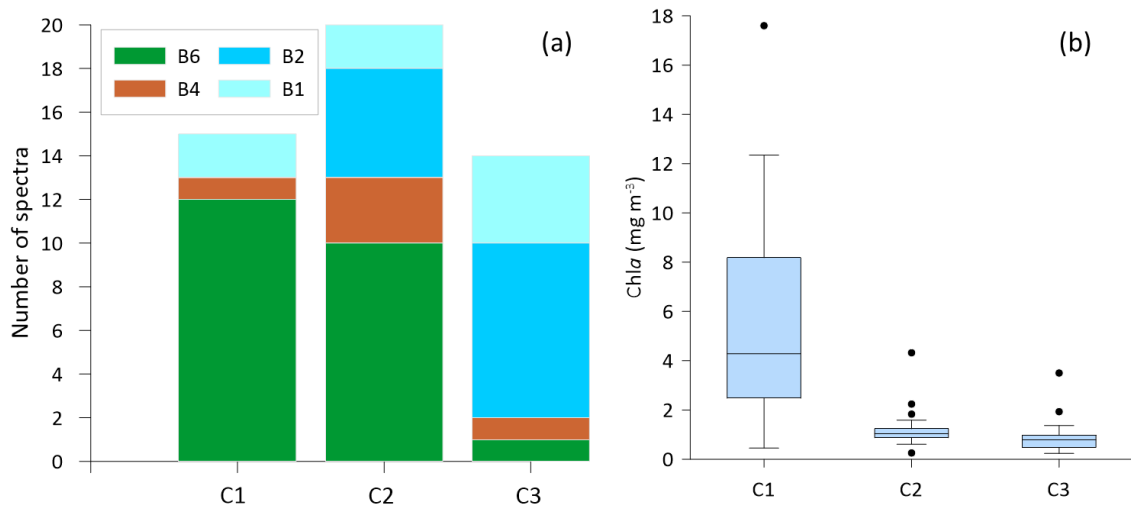


Figura 5. (a) Distribución del número de espectros de $R_{rs_TriOS_n}(\lambda)$ por estación y por grupo (C1, C y C3); (b) Análisis de cajas y bigotes de la variabilidad de la concentración de Chla (mg m^{-3}) por grupo. Los bigotes muestran el valor máximo y mínimo, y las cajas muestran los cuartiles (Q-25, mediana, y Q-75). Los puntos representan los valores extremos.

5.5.2 Evaluación estándar de los productos satelitales

5.5.2.1 Comparaciones de la Chla

La Chla satelital derivada de todos los sensores satelitales y algoritmos sobreestimó la Chla *in situ* ($\text{BIAS} > 1$) (Tabla 3, Fig. S2). Sin embargo, la Chla_{OC4} fue la que mostró el mayor error ($\text{MAE}=5.76$) y la mayor sobreestimación ($\text{BIAS}=5.45$), seguido de la Chla_{JPSS1_OC3V}. La Chla_{NN} y Chla_{SNPP_OC3V} mostraron un mejor desempeño, a pesar de que aún existe sobreestimación de la Chla *in situ* de hasta ~88% ($\text{BIAS}=1.88$). Por otro lado, es importante destacar las diferencias observadas entre los VIIRS, ya que la estimación de la Chla_{JPSS1_OC3V} ($\text{BIAS}=3.68$) es ~100 veces mayor a la Chla_{SNPP_OC3V} ($\text{BIAS}=1.88$). Debido a que ambos sensores utilizan el algoritmo OC3V para derivar las concentraciones de Chla, estas diferencias pueden estar relacionadas a las mediciones de

$R_{rs}(\lambda)$ realizadas por cada sensor, lo que afecta directamente al desempeño del algoritmo (Ecuaciones 5, 6 y 7).

Tabla 3. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de las estimaciones de la concentración de Chla por los sensores OLCI y VIIRS y sus algoritmos (OC4, NN y OC3V). En negritas se indica cuál algoritmo presentó el mejor desempeño.

Algoritmo	N	BIAS	MAE
Chla _{OC4}	35	5.45449	5.76456
Chla_{NN}	23	1.88113	2.37881
Chla _{SNPP_OC3V}	36	1.88231	2.43015
Chla _{JPSS1_OC3V}	32	3.68333	3.86842

Las sobreestimaciones observadas anteriormente por parte de todos los sensores y algoritmos sugieren dos posibles explicaciones: 1) pobre desempeño en las mediciones de $R_{rs}(\lambda)$, las cuales son la entrada para el desarrollo del algoritmo, lo cual a su vez sugiere errores en las respectivas correcciones atmosféricas, y 2) pobre desempeño en los parámetros del algoritmo. Una forma de evaluar el desempeño de las correcciones atmosféricas es comparando la $R_{rs}(\lambda)$ derivadas de los sensores y la $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$, lo que se describe en la siguiente sección.

5.5.2.2 Comparaciones de la $R_{rs}(\lambda)$

El análisis de las gráficas de dispersión entre la $R_{rs_OLCI}(\lambda)$, $R_{rs_SNPP}(\lambda)$, $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$ y la $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ para las cuatro bandas espectrales (Tabla 4, Figs. S3-S5) mostró una subestimación general de la información *in situ*. Estadísticamente esta subestimación se reflejó en un $BIAS < 1$.

La subestimación fue menor para las $R_{rs_OLCI}(\lambda)$, donde se observaron BIAS con valores más cercanos a la unidad y los MAE fueron los más bajos de todos los observados, sobre todo a los 560 nm. Por otro lado, las $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ presentaron un desempeño intermedio entre $R_{rs_OLCI}(\lambda)$ y $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$, siendo este último el que presentó la mayor subestimación de las $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ con los BIAS más bajos y los máximos valores de MAE. Nuevamente, se destacaron las diferencias entre los estadísticos para las $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ y las $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$, los cuales indican que las mediciones de las $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ son aproximadamente un orden de magnitud mayor que las $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$.

Tabla 4. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de los tres sensores (OLCI, SNPP y JPSS1) para estimar la $R_{rs}(\lambda)$ medida *in situ*.

Producto	N	BIAS	MAE
R_{rs_OLCI} (443)	12	0.23831	4.24606
R_{rs_OLCI} (490)	14	0.21847	4.57721
R_{rs_OLCI} (510)	16	0.21709	4.60630
R_{rs_OLCI} (560)	18	0.38981	2.56531
R_{rs_SNPP} (410)	24	0.08939	11.18579
R_{rs_SNPP} (443)	25	0.10358	9.65398
R_{rs_SNPP} (486)	26	0.12062	9.75841
R_{rs_SNPP} (551)	27	0.13143	7.60821
R_{rs_JPSS1} (411)	5	0.05965	17.47049
R_{rs_JPSS1} (445)	18	0.05430	18.41601
R_{rs_JPSS1} (489)	22	0.06627	15.08901
R_{rs_JPSS1} (556)	22	0.09679	10.33119

Para poder explicar las diferencias entre los datos del SNPP y JPSS1 se realizó una evaluación utilizando el BIAS con la finalidad de comparar las mediciones realizadas entre estos dos sensores (Tabla 5; Fig. S6). Se destacó que los valores de R_{rs_JPSS1} son más bajos que los derivados del SNPP ($BIAS < 1$). Sin embargo, es a los 489/486 nm donde las diferencias son más grandes ($BIAS=0.12$, es decir, las R_{rs_JPSS1} son ~88% menores que las R_{rs_SNPP}). Por otro lado, a los 556/551 nm las diferencias entre los sensores disminuyen ($BIAS=0.78$; es decir, la R_{rs_JPSS1} es ~22% menor que R_{rs_SNPP}).

Tabla 5. Resumen de los análisis estadísticos que comparan las $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$ vs $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ para las bandas centradas en el azul y verde.

R_{rs_JPSS1} VS R_{rs_SNPP}	N	BIAS
411 VS 410	7	0.44118
445 VS 443	25	0.45240
489 VS 486	24	0.12272
556 VS 551	29	0.78813

5.5.3 Evaluación de los algoritmos

Las comparaciones estadísticas realizadas entre la *Chla in situ* y la derivada de la aplicación de los algoritmos OC4 y OC3V usando las $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ muestran que existe una sobrestimación en general por parte de todos los algoritmos ($BIAS > 1$) (Tabla 6, Fig. S7).

Tabla 6. Resumen de los análisis estadísticos que evalúan el desempeño de cinco algoritmos (OC4, SNPP_OC3V, JPSS1_OC3V, AG and AGC) para estimar la concentración de Chla usando como entrada la $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$. En negritas se indica cuál algoritmo presentó el mejor desempeño.

Modelo	N	BIAS	MAE	Overall wins (%)
Chla _{TriOS_OC4}	38	2.39858	2.60957	71.2
Chla _{TriOS_SNPP_OC3V}	38	1.82850	2.11977	80.1
Chla _{TriOS_JPSS1_OC3V}	38	1.88874	2.15175	79.1
Chla _{TriOS_AG}	38	1.53527	1.85783	84.6
Chla_{TriOS_AGC}	38	1.52359	1.84740	84.7

El menor desempeño se observó con el algoritmo OC4, el cual presentó la máxima sobreestimación de la Chla (BIAS > 2), y a su vez presentó el mayor error (MAE=2.60) y el menor porcentaje de “overall wins” de todos los algoritmos evaluados. El algoritmo OC3V presentó un mejor desempeño y sin diferencias marcadas entre el SNPP y el JPSS1; ambos con una sobreestimación de la Chla *in situ* del 82 al 88% y errores que variaron entre 2.11 y 2.15. Finalmente, los algoritmos regionales (AG y AGC) fueron los que presentaron el mejor desempeño con una sobreestimación de la MAE) con una diferencia mínima entre ambos. El porcentaje de sobreestimación Chla *in situ* de aproximadamente 52% y un MAE de 1.85, lo cual, a su vez, resultó en el porcentaje de overall win más bajo (mejor modelo).

5.6 Discusiones

5.6.1. Variabilidad óptica

Los cuerpos de agua costeros pueden presentar una amplia variabilidad óptica que se manifiesta en patrones espectrales distintivos (Hieronimy, 2019; Casey et al., 2020). En la BTS esto fue evidenciado por los amplios intervalos de variación en la magnitud y forma de los espectros de reflectancia, lo que resultó en diferentes grupos de curvas espectrales (Fig. 4), cada una de estas asociadas a diferentes intervalos de concentración de *Chla* (Fig. 5b). Lo anterior se puede relacionar a diferentes procesos de circulación que se dan al interior de la bahía, los cuales resultan en contrastes biogeoquímicos que han permitido observar diferencias entre la zona interna y externa de la misma (Delgadillo-Hinojosa et al., 2015; Ramírez-Altamirano et al., 2023) que pueden tener un efecto en la abundancia de las comunidades fitoplanctónicas y por tanto en la concentración de *Chla*. Así, en el grupo C1 dominaron curvas provenientes de la zona interna de la bahía, caracterizadas por espectros con máximos entre 560 y 570 nm (Fig. 4), lo que está relacionado a aguas con altas concentraciones de *Chla* donde el fitoplancton tiende a dominar la absorción de luz, con una participación menor del CDOM y NAP (Hieronimy, 2019). Por otro lado, en el grupo C3 se encontró un dominio de curvas provenientes de la zona externa, donde las bajas concentraciones de *Chla* se reflejaron en curvas con una señal más marcada hacia las longitudes de onda más bajas, que coincide con condiciones de aguas más oligotróficas (Favareto et al., 2018; Casey et al., 2020). Finalmente, el grupo C2 reflejó la variabilidad espacial de la bahía, ya que se relacionó a curvas provenientes tanto de la zona interna como externa. Esto concuerda con el estudio de Larios-Muñiz et al., (2024), quienes reportaron que, en la zona interna de la bahía la contribución de los

tres componentes (fitoplancton, CDOM y NAP) a la absorción de luz resulta ser más similar por cada uno de ellos. Sin embargo, a medida que la distancia de la costa aumenta, la contribución del NAP va disminuyendo y el fitoplancton y el CDOM van a dominar. Estos gradientes espaciales, del fitoplancton, CDOM y NAP, se pueden atribuir a diferencias en la influencia de los aportes continentales y los procesos de retención de material particulado, los cuales son modulados por diferentes patrones de circulación y mezcla en la BTS (Flores-Vidal et al., 2018; Navarro-Olache et al., 2022).

Un ejemplo particular de la variabilidad óptica de la bahía es el espectro de reflectancia D38 (línea azul en negritas Fig. 4d), el cual pertenece al grupo C3, y cuyos máximos valores de R_{rs} se presentaron ligeramente desplazados hacia el ultravioleta (366 nm) pero también hacia el verde-amarillo (560 nm), en comparación a los demás espectros. Este espectro proviene de un periodo afectado por florecimientos algales de la diatomea *Pseudo-nitzschia* spp, el cual se desarrolló desde el sur de California (USA) (<https://sccoos.org/california-hab-bulletin/april-2023/>) hasta Baja California. En nuestros datos, los análisis al microscopio mostraron el dominio de *Pseudo-nitzschia* spp. (datos no publicados) y una concentración de Chla de 3.5 mg m^{-3} (valor extremo en Fig. 5b), lo que parece haber generado condiciones ópticas particulares. Son limitados los trabajos que evalúan la firma espectral de *Pseudo-nitzschia* spp. (Anderson et al., 2009; González-Vilas et al., 2024) pero concuerdan en que, ante condiciones de florecimientos, se observa una disminución de la reflectancia a los 412 nm en comparación a los 555 nm, lo que concuerda con nuestros datos.

5.6.2 Evaluación de los productos satelitales

La validación de los productos satelitales mediante la comparación con datos *in situ* representa un paso fundamental para evaluar la confiabilidad de estas mediciones en los ecosistemas costeros. En este estudio, nuestros resultados mostraron que, independiente del sensor remoto utilizado, la *Chla in situ* es fuertemente sobreestimada en la BTS (Tabla 3). Sin embargo, la $Chla_{NN}$ fue la que presentó el mejor desempeño (Tabla 3, Fig. S2b), lo que era esperado en vista de que el algoritmo NN se basa en un enfoque de aprendizaje automático que utiliza información de las propiedades ópticas inherentes del agua, lo que permite identificar de manera más robusta las relaciones no lineales entre las señales ópticas y las concentraciones de *Chla*, especialmente en aguas ópticamente complejas (Brockmann et al., 2016). Por otro lado, aunque el algoritmo NN puede ser más preciso, también requiere un mayor número de parámetros de entrada para su entrenamiento (ej. coeficiente de dispersión), lo que debe ser tomado en consideración si se busca realizar adaptaciones regionales al mismo. En contraste, los algoritmos basados en regresiones y razones entre bandas son modelos más simples y más accesibles en términos de implementación y ajuste de parámetros.

Entre los algoritmos basados en razones entre bandas analizados en este estudio, el OC3V mostró el mejor desempeño cuando se derivó del sensor SNPP ($Chla_{SNPP_OC3V}$), con un ajuste de los datos muy similar al obtenido por la $Chla_{NN}$ con estadísticos prácticamente iguales (Tabla 3). Sin embargo, es importante considerar que las estimaciones por este sensor tienen un mejor ajuste cuando las concentraciones de *Chla* son bajas ($Chla < 1 \text{ mg m}^{-3}$) (Kahru et al., 2014). En nuestro trabajo, el 48% de los datos presentaron concentraciones de *Chla* menores a 1 mg m^{-3} y los datos que más contribuyen

a la sobrestimación son aquellos que componen las curvas agrupadas en C1 (puntos rojos en Fig. S2), que son los caracterizados por concentraciones de $Chla > 1 \text{ mg m}^{-3}$ y con predominio de datos provenientes de estaciones cercanas a la costa.

En contraste con lo observado con el SNPP, la $Chla_{JPSS1_OC3V}$ presentó un desempeño menos favorable, con una sobreestimación de 268% (BIAS = 3.68). Además, la $Chla_{JPSS1_OC3V}$ presentó un error absoluto medio de 3.68 en comparación a 2.43 de la $Chla_{SNPP_OC3V}$ (Tabla 3), lo que indica que la estimación de $Chla$ por el JPSS1 es un orden de magnitud mayor a la del SNPP. No existen estudios previos que reporten evaluaciones del desempeño de los productos derivados del sensor JPSS1 en esta región del Pacífico Nororiental, lo cual dificulta la comparación e interpretación de estos contrastes observados. Sin embargo, tanto el SNPP como el JPSS1 emplean el mismo algoritmo (OC3V), cuentan con bandas centradas en longitudes de onda muy similares (Tabla 2) y los coeficientes del polinomio difieren ligeramente (Ec. 6 y 7). Por lo tanto, las diferencias observadas entre estos se atribuyen a las diferencias en las mediciones de $R_{rs}(\lambda)$ (Tabla 5; Fig. S6). Como se mencionó anteriormente, los algoritmos de la generación OCx trabajan con base en una razón entre una banda en el azul y una en el verde. Si las mediciones de la R_{rs_JPSS1} (489 nm) son menores que las mediciones de la R_{rs_SNPP} (486 nm), mientras en la banda verde (551 o 556 nm) los valores de $R_{rs}(\lambda)$ son más cercanos (Tabla 5; Fig. S6), esto resultará en un valor más alto de la máxima razón entre bandas (MBR) para el JPSS1. Esto, a su vez, va a determinar que las concentraciones de $Chla$ derivadas de este sensor ($Chla_{JPSS1_OC3V}$) sean más altas que aquellas derivadas del SNPP, tal y como se observó en nuestros datos.

Las diferencias entre las mediciones de $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$ y $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ sugieren errores en las correcciones atmosféricas utilizadas para estos sensores, sobre todo porque las mayores diferencias se dan en las mediciones de las $R_{rs}(\lambda)$ en las bandas azules (Tabla 4). Las correcciones atmosféricas suelen presentar porcentajes de error más grandes en las bandas azules debido a la intensa dispersión de la luz provocada por los componentes atmosféricos como vapor de agua y aerosoles (IOCCG, 2019). Sin embargo, en este trabajo, las $R_{rs}(\lambda)$ nivel L1 derivados de ambos sensores VIIRS fueron procesados con la misma versión de SeaDAS (9.0.1/L2gen), lo que se realizó con la finalidad de garantizar consistencia en las correcciones atmosféricas y banderas de calidad. Debido a lo anterior, las mediciones de $R_{rs}(\lambda)$ derivadas de ambos sensores VIIRS (Tabla 4) deberían compartir esa consistencia en la incertidumbre asociada con las correcciones atmosféricas, lo cual no sucedió. Por lo tanto, esto nos llevó a considerar otras fuentes de error que pudieran estar causando estos contrastes. Lyapustin et al. (2023) mencionan que pueden darse diferencias de calibración entre los sensores VIIRS-SNPP y VIIRS-JPSS1 de entre el 5 y el 7% y que, en promedio, existe una mejor calibración para el SNPP a lo largo del espectro, mientras que el JPSS1 está mejor calibrado para longitudes de onda más altas. Esto se debe de tomar en cuenta puesto que sugiere ser un factor clave en las diferencias de $R_{rs}(\lambda)$ observadas entre los sensores VIIRS en nuestros resultados y debe ser tomado en consideración en estudios futuros que utilicen la información derivada de estos.

Finalmente, el pobre desempeño de la $Chla_{OC4}$ observado en este trabajo (BIAS=445% y MAE=5.76; Tabla 3, Fig. S2), está relacionado a las altas concentraciones de $Chla$ presentes en la bahía. Esto concuerda con estudios previos (Vanhellemont y Ruddick, 2021; Zhou et al., 2023) en aguas meso-eutróficas ($Chla > 2 \text{ mg m}^3$) los cuales

atribuyen parte de estas incertidumbres a las correcciones atmosféricas utilizadas por el OLCI, como son la BAC (por baseline atmospheric correction) y BPAC (por bright pixel correction) (Antoine and Morel, 1999; EUMETSAT, 2021a). Estos trabajos han demostrado que, a diferencia de otras correcciones atmosféricas (i.e. POLYMER, L2gen, etc.), existe mayor incertidumbre asociada a las estimaciones de Chl_a cuando se utiliza la BAC/BPAC en zonas cercanas a la costa. Lo anterior debe ser considerado ya que, al igual que en el agua, los componentes ópticamente activos presentes en la atmósfera de las zonas cercanas a la costa suelen estar conformados por una combinación de aerosoles locales no estándar, es decir, con propiedades ópticas distintas a las asumidas por los algoritmos de corrección atmosférica globales (Windle et al., 2022). Particularmente, el clima del norte de la península de Baja California experimenta variaciones influenciadas por su proximidad al océano Pacífico y fenómenos como las surgencias costeras, las cuales generan humedad (Lewis et al., 2003). Además, la presencia de brisa marina (Ibarra-Romero et al., 2025) y polvo mineral resultado de la interacción con una región continental semi-desértica (Morales-Acuña et al., 2019) pueden generar condiciones que afectan los modelos globales de corrección atmosférica. Por otro lado, la complejidad óptica de las aguas costeras asociadas a mayor turbidez y presencia de diferentes componentes ópticamente activos, modifican la $R_{rs}(\lambda)$ y alteran la relación entre las bandas espectrales usadas en las correcciones atmosféricas, lo que es especialmente marcado para aquellas correcciones que se basan en el método de infrarrojo cercano o NIR (Muller-Karger et al., 2018), como en el caso de las BAC utilizadas por el OLCI.

5.6.3 Evaluación de los algoritmos

La evaluación del desempeño de los algoritmos mostró que el algoritmo regional

AGC es el que está asociado a los menores errores en la estimación de la concentración de *Chl_a* en la BTS (Tabla 6). De acuerdo a McClain (2009) y Werdell et al. (2023), la precisión de los productos satelitales para estimar la *Chl_a* deben estar en $\pm 35\%$ en aguas oceánicas. El algoritmo AGC obtuvo un BIAS del 53% y el MAE más bajo, lo que confirma que ajustes simples a algoritmos globales pueden mejorar considerablemente la precisión de esta variable en zonas costeras. Sin embargo, el algoritmo AGC se desarrolló con base en datos provenientes de las aguas frente a la península de Baja California, las cuales fueron caracterizadas por concentraciones de *Chl_a* inferiores a las encontradas en la Bahía de Todos Santos y, probablemente, con menor interferencia por otros componentes como el CDOM y el NAP, dada su distancia de la costa. Esto sugiere que este algoritmo puede aún ser optimizado si se calibra con datos de la bahía.

Por otro lado, entre los algoritmos globales, el OC3V fue más preciso que el OC4 para estimar la concentración de *Chl_a*. Esto es especialmente relevante si se busca perfeccionar estos algoritmos para su uso en aguas con características ópticas similares a las de la Bahía de Todos Santos.

Cabe mencionar que la evaluación del desempeño de estos algoritmos solo fue posible cuando se usaron las $R_{rs}(\lambda)$ medidas con los sensores TriOS, lo que permitió destacar tanto la relevancia de contar con información *in situ* de las propiedades ópticas de una región como la importancia de la precisión en la estimación de las reflectancias satelitales y las correcciones atmosféricas en el producto final que es derivado de los sensores remotos.

5.7 Conclusiones

En este estudio se evaluaron productos satelitales generados a partir de procesamientos estándar, incluyendo algoritmos y correcciones atmosféricas globales, con el objetivo de cuantificar los errores asociados a la estimación de $Chla$ en un entorno costero ópticamente complejo como la Bahía de Todos Santos.

Se pudo identificar que, entre los algoritmos estándar, el algoritmo NN aplicado a datos OLCI y el OC3V aplicado a datos del sensor VIIRS-SNPP proporcionaron las estimaciones más precisas de $Chla$, superando notablemente el desempeño del algoritmo OC4. Este resultado es consistente con el diseño del modelo NN, optimizado para operar en aguas con alta complejidad óptica.

A su vez, las subestimaciones de las reflectancias espectrales ($R_{rs}(\lambda)$) derivadas de los sensores tuvieron un impacto directo y significativo en la sobreestimación de la $Chla$. A pesar de ello, las $R_{rs}(\lambda)$ generadas por el sensor OLCI mostraron el mejor desempeño en términos de consistencia con las mediciones *in situ*, lo que resalta su valor para aplicaciones en zonas costeras.

Finalmente, el algoritmo regional AGC demostró ser el más preciso para estimar la $Chla$ en la BTS, con una reducción significativa del sesgo en comparación con los modelos globales. Por ello, se recomienda su adopción para el monitoreo regular de la variabilidad espacial y temporal de la biomasa fitoplanctónica en esta bahía.

Estos hallazgos subrayan la importancia de adaptar y validar algoritmos en función de las condiciones ópticas regionales, especialmente en ecosistemas costeros, donde el uso de modelos globales puede generar incertidumbres considerables. La implementación de modelos regionales validados como AGC representa un paso clave hacia un monitoreo satelital más preciso y operativo en estas zonas.

5.8 Referencias

- Alvarado-Graef, P., Martín-Atienza, B., Sosa-Ávalos, R., Durazo, R., and Hernández-Walls, R. (2024). Evaluation of Ocean Color Algorithms to Retrieve Chlorophyll-a Concentration in the Mexican Pacific Ocean off the Baja California Peninsula, Mexico. *Remote Sensing*, 16(10), 1748. <https://doi.org/10.3390/rs16101748>
- Anderson, C. R., Siegel, D. A., Kudela, R. M., and Brzezinski, M. A. (2009). Empirical models of toxicogenic Pseudo-nitzschia blooms: potential use as a remote detection tool in the Santa Barbara Channel. *Harmful Algae*, 8(3), 478-492. <https://doi.org/10.1016/j.hal.2008.10.005>
- Antoine, D. (2010). OLCI Level 2. Algorithm Theoretical Basis Document. Ocean Colour Products in case 1 waters. Ref: S3-L2-SD-03- C10-LOV-ATBD. Issue: 2.2 Date: July 13, 2010 Page:2
- Antoine, D., and Morel, A. (1999). A multiple scattering algorithm for atmospheric correction of remotely sensed ocean colour (MERIS instrument): principle and implementation for atmospheres carrying various aerosols including absorbing ones. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9), 1875-1916.
- Barnes, B. B., Cannizzaro, J. P., English, D. C., and Hu, C. (2019). Validation of VIIRS and MODIS reflectance data in coastal and oceanic waters: An assessment of methods. *Remote Sensing of Environment*, 220, 110-123. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2018.10.034>
- Bricaud, A., Babin, M., Claustre, H., Ras, J., and Tièche, F. (2010). Light absorption properties and absorption budget of Southeast Pacific waters. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 115(C8). <https://doi.org/10.1029/2009JC005517>
- Brockmann, C., Doerffer, R., Peters, M., Kerstin, S., Embacher, S., and Ruescas, A. (2016). Evolution of the C2RCC neural network for Sentinel 2 and 3 for the retrieval of ocean colour products in normal and extreme optically complex waters. In Living Planet Symposium (Vol. 740, p. 54).
- Calbet, A., and Landry, M. R. (2004). Phytoplankton growth, microzooplankton grazing, and carbon cycling in marine systems. *Limnology and Oceanography*, 49(1), 51-57. <https://doi.org/10.4319/lo.2004.49.1.0051>
- Casey, K. A., Rousseaux, C. S., Gregg, W. W., Boss, E., Chase, A. P., Craig, S. E., Mouw, C. B., Reynolds, R. A., Stramski, D., Ackleson, S. G., Bricaud, A., Schaeffer, B., Lewis, M. R., and Maritorena, S. (2020). A global compilation of in situ aquatic high spectral resolution inherent and apparent optical property data for remote sensing applications, *Earth Syst. Sci. Data*, 12, 1123–1139, <https://doi.org/10.5194/essd-12-1123-2020>.

- Delgadillo-Hinojosa, F., Camacho-Ibar, V., Huerta-Díaz, M.A., Torres-Delgado, V., Pérez- Brunius, P., Lares, L., Marinone, S.G., Segovia, J.A., Pena-Manjarrez, J.L., García-Mendoza, E., Castro, R., (2015). Seasonal behavior of dissolved cadmium and Cd/PO₄ ratio in Todos Santos Bay: a retention site of upwelled waters in the Baja California peninsula, Mexico. *Mar. Chem.* 168, 37–48. <https://doi.org/10.1016/j.marchem.2014.10.010>.
- Dierssen, H. M. (2010). Perspectives on empirical approaches for ocean color remote sensing of chlorophyll in a changing climate. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(40), 17073-17078. <https://doi.org/10.1073/pnas.0913800107>
- Durazo, R., Castro, R., Miranda, L.E., Delgadillo-Hinojosa, F., Mejía-Trejo, A., (2017). Anomalous hydrographic conditions off the northwestern coast of the Baja California Peninsula during 2013-2016. *Cienc. Mar.* 43 (2), 81–92. <https://doi.org/10.7773/cm.v43i2.2754>.
- Favareto, L. R., Rudorff, N., Kampel, M., Frouin, R., Röttgers, R., Doxaran, D., Murakami, H., Dupouy, C. (2018). Bio-optical characterization and ocean colour inversion in the Eastern Lagoon of New Caledonia, South Tropical Pacific. *Remote Sensing*, 10(7), 1043. <https://doi.org/10.3390/rs10071043>
- Flores-Vidal, X., Gonzalez-Montes, S., Zertuche-Chanes, R., Rodríguez-Padilla, I., Marti, C.L., Imberger, J., Mejia-Trejo, A., Durazo-Arvizu, R., Navarro-Olache, L., (2018). Three-dimensional exchange flows in a semi-enclosed bay: numerical simulations and high frequency radar observations. *Estuar., Coast. Shelf Sci.* 210, 26–35. <https://doi.org/10.1016/j.ecss.2018.05.027>.
- Froidefond, J. M., and Ouillon, S. (2005). Introducing a mini-catamaran to perform reflectance measurements above and below the water surface. *Optics Express*, 13(3), 926-936. <https://doi.org/10.1364/OPEX.13.000926>
- Giannini, F., Hunt, B. P., Jacoby, D., Costa, M. (2021). Performance of OLCI Sentinel-3A satellite in the Northeast Pacific coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 256, 112317. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112317>
- González Vilas, L., Spyrakos, E., Pazos, Y., and Torres Palenzuela, J. M. (2024). A new algorithm using support vector machines to detect and monitor bloom-forming *Pseudo-nitzschia* from OLCI data. *Remote Sensing*, 16(2), 298. <https://doi.org/10.3390/rs16020298>

- Hieronymi, M. (2019). Spectral band adaptation of ocean color sensors for applicability of the multi-water biogeo-optical algorithm ONNS. *Optics Express*, 27(12), A707-A724. <https://doi.org/10.1364/OE.27.00A707>
- Hlaing, S., Harmel, T., Gilerson, A., Foster, R., Weidemann, A., Arnone, R., Wang, M., and Ahmed, S. (2013). Evaluation of the VIIRS ocean color monitoring performance in coastal regions. *Remote Sensing of Environment*, 139, 398-414. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2013.08.013>
- Ibarra-Romero, J., Mateos, E., and Marinone, S. G. (2025). The effects of summer breeze on Todos Santos Bay current, Ensenada, BC, Mexico. *Continental Shelf Research*, 285, 105388. <https://doi.org/10.1016/j.csr.2024.105388>
- IOCCG (2000). Remote Sensing of Ocean Colour in Coastal, and Other Optically-Complex, Waters. Sathyendranath, S. (ed.), Reports of the International Ocean-Colour Coordinating Group, No. 3, IOCCG, Dartmouth, Canada.
- IOCCG (2006). Remote Sensing of Inherent Optical Properties: Fundamentals, Tests of Algorithms, and Applications. Lee, Z.-P. (ed.), Reports of the International Ocean-Colour Coordinating Group, No. 5, IOCCG, Dartmouth, Canada.
- IOCCG (2019). Uncertainties in Ocean Colour Remote Sensing. Mélin F. (ed.), IOCCG Report Series, No. 18, International Ocean Colour Coordinating Group, Dartmouth, Canada. <http://dx.doi.org/10.25607/OBP696>
- Jeffrey, S.W., Mantoura, R.F.C., Wright, S.W., (1997). *Phytoplankton Pigments in Oceanography: Guidelines and Modern Methods*. UNESCO Publishing, Paris, p. 661.
- Kahru, M., Kudela, R. M., Anderson, C. R., Manzano-Sarabia, M., and Mitchell, B. G. (2014). Evaluation of satellite retrievals of ocean chlorophyll-a in the California Current. *Remote Sensing*, 6(9), 8524-8540. <https://doi.org/10.3390/rs6098524>
- Kirk, J.T.O. (2011). *Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems*, 3rd ed.; Cambridge University Press: Cambridge, UK, 2011; p. 649.
- Kurczyn, J.A., Pérez-Brunius, P., Lopez, M., Candela, J., Delgadillo-Hinojosa, F., García-Mendoza, E., (2019). Water masses and ocean currents over the continental slope off northern Baja California. *J. Geophys. Res.: Oceans* 124 (4), 2803–2823. <https://doi.org/10.1029/2018JC013962>.

- Larios-Muñiz, M., Gonzalez-Silvera, A., Santamaria-del-Ángel, E., Guzmán-Hernández, M. E., Betancur-Turizo, S., Torres-Beltrán, M., and López-Calderón, J. (2024). Light absorption properties of dinoflagellate blooms in Todos Santos Bay, Mexico (northeast Pacific Ocean). *Regional Studies in Marine Science*, 72, 103438. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2024.103438>
- Lavigne, H., Van der Zande, D., Ruddick, K., Dos Santos, J. C., Gohin, F., Brotas, V., Kratzer, S. (2021). Quality-control tests for OC4, OC5 and NIR-red satellite chlorophyll-a algorithms applied to coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 255, 112237. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2020.112237>
- Lewis, J. M., Koracin, D., Rabin, R., and Businger, J. (2003). Sea fog off the California coast: Viewed in the context of transient weather systems. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D15). <https://doi.org/10.1029/2002JD002833>
- Luz, L.F., and Noernberg, M.A., (2022). Spectral changing during a massive bloom event of *Dinophysis cf. accuminata* in south Brazil. *Reg. Stud. Mar. Sci.* 56, 102681 <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2022.102681>.
- Lyapustin, A., Wang, Y., Choi, M., Xiong, X., Angal, A., Wu, A., Doelling, D., Bhatt, R., Go, S., Korking, S., Franz, B., Meister, G., Sayer, A., Roman, M., Holz, R., Meyer, K., Gleason, J., Levy, R. (2023). Calibration of the SNPP and NOAA 20 VIIRS sensors for continuity of the MODIS climate data records. *Remote Sensing of Environment*, 295, 113717. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2023.113717>
- McCarthy, M. J., Colna, K. E., El-Mezayen, M. M., Laureano-Rosario, A. E., Méndez-Lázaro, P., Otis, D. B., Toro-Farmer, G., Vega-Rodríguez, M., Muller-Karger, F. E. (2017). Satellite remote sensing for coastal management: A review of successful applications. *Environmental management*, 60, 323-339. <https://doi.org/10.1007/s00267-017-0880-x>
- McClain, C., R. (2009). A Decade of Satellite Ocean Color Observations. *Annual Review of Marine Science*, 1(1), 19-42. <https://doi.org/10.1146/annurev.marine.010908.163650>
- Morales-Acuña, E., Torres, C. R., Delgadillo-Hinojosa, F., Linero-Cueto, J. R., Santamaría-del-Ángel, E., Castro, R. (2019). The Baja California Peninsula, a significant source of dust in Northwest Mexico. *Atmosphere*, 10(10), 582. <https://doi.org/10.3390/atmos10100582>

- Morel, A., Prieur, L. (1977). Analysis of variations in ocean color. *Limnology. Oceanography*, 22: 709-722.
- Muller-Karger, F. E., Hestir, E., Ade, C., Turpie, K., Roberts, D. A., Siegel, D., Miller, R., Humm, D., Izenberg, N., Keller, M., Froin, R., Dekker, A., Gardner, R., Goodman, J., Schaeffer, B., Franz, B., Pahlevan, N., Mannino, A., Concha, J., Ackleson, S., Cavanaugh, K., Romanou, A., Tzortziou, M., Boss, E., Pavlick, R., Freeman, A., Rousseaux, C., Dunne, J., Long, M., Klein, E., McKinley, G., Goes, J., Letelier, R., Kavanaugh, M., Roffer, M., Bracher, A., Arrigo, K., Dierssen, H., Zhang, X., Davis, F., Best, B., Guralnick, R., Moisan, J., Sosik, H., Kudela, R., Mouw, C., Barnard, A., Palacios, S., Roesler, C., Drakou, E., Appeltans, W., Jetz, W. (2018). Satellite sensor requirements for monitoring essential biodiversity variables of coastal ecosystems. *Ecological applications*, 28(3), 749-760. <https://doi.org/10.1002/eap.1682>
- Navarro-Olache, L. F., Castro, R., Durazo, R., Hernández-Walls, R., Mejía-Trejo, A., Flores-Vidal, X., Flores-Morales, A. L. (2021). Influence of Santa Ana winds on the surface circulation of Todos Santos Bay, Baja California, Mexico. *Atmósfera*, 34(1), 97-109. <https://doi.org/10.20937/atm.52719>
- O'Reilly, J. E., and Werdell, P. J. (2019). Chlorophyll algorithms for ocean color sensors-OC4, OC5 and OC6. *Remote sensing of environment*, 229, 32-47. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2019.04.021>
- Page, G. W., Palacios, E., Alfaro, L., Gonzalez, S., Stenzel, L. E., Jungers, M. (1997). Numbers of Wintering Shorebirds in Coastal Wetlands of Baja California, Mexico (Numeros de Aves Playeras Invernando en los Anegados Costeros de Baja California, Mexico). *Journal of Field Ornithology*, 562-574. <https://www.jstor.org/stable/4514266>
- Ramírez-Altamirano, Y. L., González-Silvera, A., López-Calderón, J., Santamaria-del-Angel, E. (2023). Evaluation of the taxonomic composition of phytoplankton using microscopy and CHEMTAX in Todos Santos Bay (Baja California, México) during 2017-2018. *Latin american journal of aquatic research*, 51(2), 218-237. <http://dx.doi.org/10.3856/vol51-issue2-fulltext-2988>
- Salamanca, M. (2024). Información ambiental de calidad: Herramienta fundamental para el manejo sustentable de los cuerpos de agua costeros. *Gayana*, 88(2), 135-137.
- Sathyendranath, S., Prieur, L., and Morel, A. (1989). A three-component model of ocean colour and its application to remote sensing of phytoplankton pigments in coastal

waters. *International Journal of Remote Sensing*, 10(8), 1373-1394.
<https://doi.org/10.1080/01431168908903974>

- Seegers, B. N., Stumpf, R. P., Schaeffer, B. A., Loftin, K. A., Werdell, P. J. (2018). Performance metrics for the assessment of satellite data products: an ocean color case study. *Optics express*, 26(6), 7404-7422.
<https://doi.org/10.1364/OE.26.007404>
- Tanahara, S., Canino-Herrera, S.R., Durazo, R., Felix-Bermúdez, A., Vivanco-Aranda, M., Morales-Estrada, E., del Carmen Lugo-Ibarra, K., (2021). Spatial and temporal variations in water quality of Todos Santos Bay, northwestern Baja California, Mexico. *Mar. Pollut. Bull.* 173, 113148
<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2021.113148>.
- Tilstone, G. H., Pardo, S., Dall'Olmo, G., Brewin, R. J., Nencioli, F., Dessailly, D., Kwiatkowska, E., Casal, T., Donlon, C. (2021). Performance of Ocean Colour Chlorophyll a algorithms for Sentinel-3 OLCI, MODIS-Aqua and Suomi-VIIRS in open-ocean waters of the Atlantic. *Remote Sensing of Environment*, 260, 112444. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112444>
- Thomas, C., (2012). The HPLC method. In: Hooker, S.B., Clementson, L., Thomas, C.S. (Eds.), *The Fifth SeaWiFs HPLC analysis round-robin experiment (SeaHARRE-5)*. NASA Technical Memorandum, Houston, pp. 63–72.
- Vanhellemont, Q., and Ruddick, K. (2021). Atmospheric correction of Sentinel-3/OLCI data for mapping of suspended particulate matter and chlorophyll-a concentration in Belgian turbid coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 256, 112284.
<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112284>
- Van-Heukelem, L., Thomas, C.S. (2001). Computer assisted high-performance liquid chromatography method development with applications to the isolation and analysis of phytoplankton pigments. *J. Chromatogr.* 910, 31–49.
[https://doi.org/10.1016/S0378-4347\(00\)00603-4](https://doi.org/10.1016/S0378-4347(00)00603-4).
- van Oostende, M., Hieronymi, M., Krasemann, H., Baschek, B. (2023). Global ocean colour trends in biogeochemical provinces. *Front. Mar. Sci.* 10, 1052166
<https://doi.org/10.3389/fmars.2023.1052166>.
- Villanueva-Fragoso, S., Ponce-Vélez, G., García, C., and Presa, J. (2010). Vulnerabilidad de la zona costera. Ecosistemas costeros. Vulnerabilidad de las zonas costeras

mexicanas ante el cambio climático, Centro EPOMEX, Campeche, 37-72. ISBN 978-607-7887-12-6

Vishnu, P. S., and Costa, M. (2023). Evaluating the performance of Sentinel-3A OLCI products in the subarctic northeast Pacific. *Remote Sensing*, 15(13), 3244. <https://doi.org/10.3390/rs15133244>

Wang, M., Liu X., Jiang, L., Son, S. (2017). The VIIRS ocean color product algorithm theoretical basis (ATDB), version 1.0.NOAA/NEDIS/STAR

Werdell, J., O'Reilly, J., Hu, C., Feng, L., Lee, Z., Franz, B., Bailey, S., Proctor, C. (2023). Chlorophyll a, v1.1, Ed. Wang, G. <https://doi.org/10.5067/JCQB8QALDOYD>

Windle, A.E.; Evers-King, H.; Loveday, B.R.; Ondrusek, M.; Silsbe, G.M. (2022). Evaluating Atmospheric Correction Algorithms Applied to OLCI Sentinel-3 Data of Chesapeake Bay Waters. *Remote Sensing*. 14, 1881. <https://doi.org/10.3390/rs14081881>

Zhou, Y., Shen, Q., Peng, H. C., Yao, Y., Wang, R., Ma, W., Shi, J. R., Ren, Y. J., Zhao, J., Xu, W. T., Hao, L., Zhang Z. J. (2023). Suitability of Sentinel-3 chlorophyll a products based on optical water types, *International Journal of Remote Sensing*, 44:4, 1369-1389, <https://doi.org/10.1080/01431161.2023.2180780>

6. Conclusiones generales

Este trabajo permitió establecer una línea base para el monitoreo de la variabilidad óptica de la Bahía de Todos Santos y sus implicaciones en la percepción remota del color del océano. En primer lugar, se pudo definir a la bahía como un sistema costero ópticamente complejo, donde los componentes dominantes son el fitoplancton y la materia orgánica disuelta cromofórica (CDOM).

En particular, durante eventos de florecimientos de dinoflagelados, se generaron condiciones ópticas destacadas por incrementos en la absorción en la región UV del espectro electromagnético atribuibles a la producción de aminoácidos tipo micosporinas (MAA). Este hallazgo resulta particularmente importante para su detección remota a partir de imágenes del color del océano, sobre todo ante misiones satelitales emergentes como PACE (NASA), que incluyen sensores hiperespectrales con capacidad en la región UV.

La complejidad óptica de la bahía también se reflejó en una gran variabilidad en la magnitud y forma de los espectros de $R_{rs}(\lambda)$, los cuales presentaron gradientes espaciales que se relacionaron a la concentración de *Chl a* y a los componentes ópticos. Esto influyó directamente en el desempeño de los productos y algoritmos satelitales y expuso sus limitaciones en la Bahía de Todos Santos.

A pesar de que los algoritmos globales sobreestiman sistemáticamente la *Chl a*, los productos derivados del OLCI-NN y del VIIRS-SNPP fueron los que presentaron el mejor desempeño (~88%). Aquí cabe considerar que el OLCI presenta una resolución espacial de 300 m mientras el VIIRS de 750 m. Sin embargo, el VIIRS tiene un periodo de revisita de 1 día, mientras el OLCI puede presentar periodos de intermitencia donde no se registran imágenes para esta región del pacífico Nororiental

(<https://user.eumetsat.int/resources/user-guides/sentinel-3-olci-level-1-data-guide#ID-OLCI-coverage>). Por lo tanto, un usuario de estas plataformas debe considerar la finalidad que se le dará a estas imágenes para decidir cuál de estos sensores sea el más apropiado.

Por otro lado, al probar los algoritmos globales y locales con datos medidos *in situ*, se pudo determinar que los más indicados para estimar la concentración de Chl a en la Bahía de Todos Santos son los algoritmos regionales. Para poder aplicar estos algoritmos a datos derivados de los sensores remotos, nuestros resultados muestran que es recomendable usar como entrada la $R_{rs}(\lambda)$ derivada del OLCI, una vez es la que presenta la menor incertidumbre en la medición de esta variable.

A pesar del buen desempeño del algoritmo regional AGC, es recomendable profundizar en su optimización con la finalidad de obtener estimaciones más precisas de la concentración de Chl a en la Bahía de Todos Santos. Se recomienda explorar la implementación de bandas en el rojo e infrarrojo cercano (660 a 750) donde la señal de la Chl a se discierne de otros componentes ópticamente activos en zonas costeras. A su vez, una base de datos mayor puede permitir aclarar tendencias que permitieran implementar ajustes de acuerdo a la zona (interna o externa) de la bahía, cosa que el número de datos considerado en este estudio no lo permitió. Se resalta la necesidad de considerar la estacionalidad, la variabilidad en los tipos funcionales del fitoplancton, y el impacto de procesos regionales en la calibración y validación de productos satelitales.

Material suplementario: Capítulo 1

Figure A.1. Scatter plot relating chlorophyll a concentration ($Chl a$, $mg\ m^{-3}$) and the absorption coefficients (a) $a_{phy}(440)$, (b) $a_{CDOM}(440)$ and (c) $a_{NAP}(440)$. The dotted line indicates the linear fit between the data (see Table 3 in the main document for statistical results).

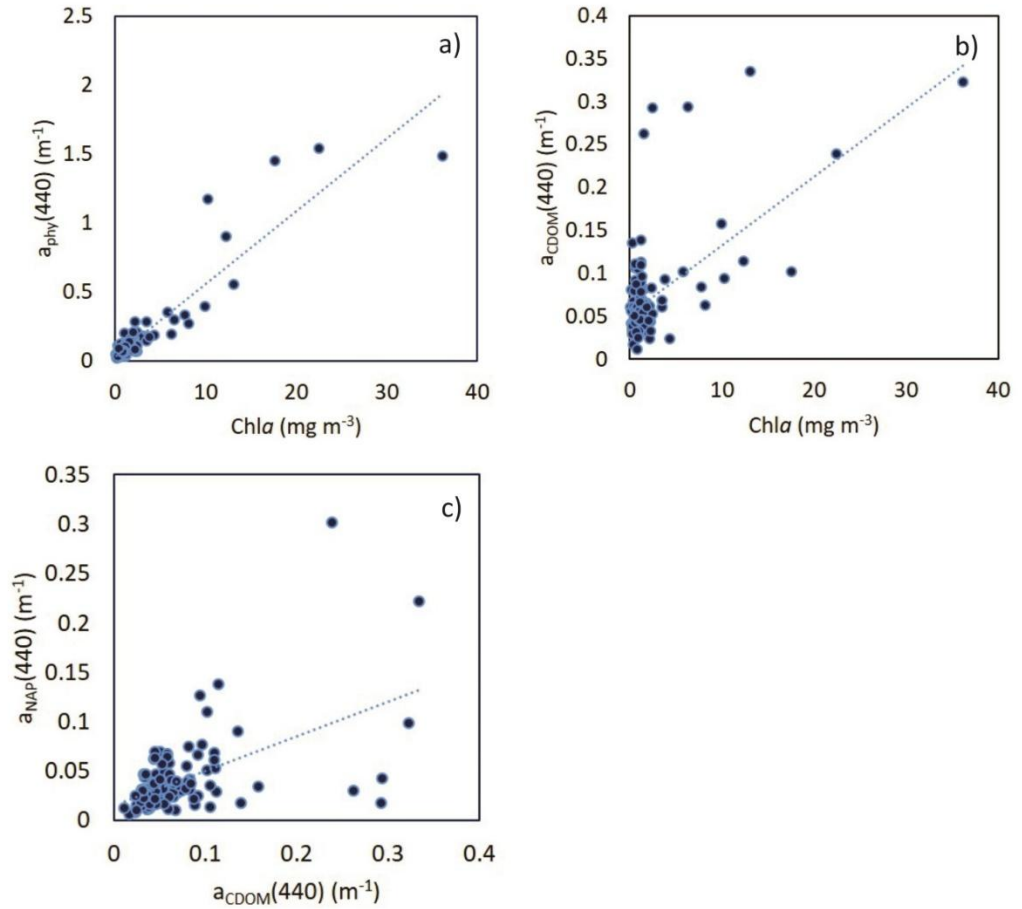


Table A.1. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in June 8th 2019, at station B1 (Event C2). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]	Genus/Species	Cell abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Bacillariophyta	
<i>Akashiwo sanguinea</i>	80	<i>Coscinodiscus</i> sp.	40
<i>Ceratium furca</i>	3,480		
<i>Ceratium pentagonum</i>	80		
<i>Cochlodinium</i> sp.	160		
<i>Dinophysis acuminata</i>	280		
<i>Dinophysis caudata</i>	40		
<i>Gonyalax</i> sp.	80		
<i>Gymnodinium</i> sp.	880		
<i>Lingulodinium polyedra</i>	103,440		
<i>Oxytoxum laticep</i>	80		
<i>Prorocentrum gracile</i>	6,800		
<i>Prorocentrum micans</i>	4,760		
<i>Protoperdinium divergens</i>	320		
<i>Protoperdinium cassum</i>	560		
<i>Tripos fusus</i>	40		
		Total	121,120

Table A.2. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in June 8th 2019, at station B6 (Event C3). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta	
<i>Akashiwo sanguinea</i>	10,300
<i>Ceratium furca</i>	26,900
<i>Ceratium pentagonum</i>	700
<i>Cochlodinium</i> sp.	300
<i>Dinophysis acuminata</i>	500
<i>Dinophysis caudata</i>	200
<i>Gonyalax</i> sp.	700
<i>Gymnodinium</i> sp.	400
<i>Lingulodinium polyedra</i>	626,700
<i>Oxhyphysis</i> sp.	600

<i>Phalacroma</i> sp.	100
<i>Prorocentrum gracile</i>	8,100
<i>Prorocentrum micans</i>	37,500
<i>Protoperidinium divergens</i>	700
<i>Pyrophacus</i> sp.	300
<i>Tripos divarcatatus</i>	2,600
<i>Tripos fusus</i>	1,200
Total	717,800

Table A.3. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in November 12th 2021, at station B6 (Event C4). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]		Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Others	
<i>Prorocentrum micans</i>	102,760		
<i>Gymnodinium</i> sp.	41,360	<i>Phaeocystis</i> sp.	8,760
<i>Prorocentrum gracile</i>	20,960	<i>Nitzschia</i> sp.	13,400
<i>Dinophysis acuminata</i>	7,680	<i>Guinardia striata</i>	440
<i>Kapelodinium</i> sp.	1,600	<i>Dictyocha fibula</i>	480
<i>Ceratium furca</i>	3,240	<i>Pseudonitzschia</i> sp.	80
<i>Lingulodinium polyedra</i>	46,000	<i>Striatella</i> sp.	40
<i>Protoperidinium divergens</i>	1,520	<i>Rhizosolenia</i> sp.	560
<i>Cochlodinium</i> sp.	6,280	<i>Thalassionema</i> sp.	40
<i>Gyrodinium</i> sp.	11,880	<i>Navicula</i> sp.	320
<i>Prorocentrum rostratum</i>	4,840	<i>Coscinodiscus</i> sp.	440
<i>Protoperidinium cassum</i>	80	<i>Asteromphalus</i> sp.	240
<i>Scrippsiella</i> sp.	200	<i>Lauderia</i> sp.	120
<i>Oxytoxum scolopax</i>	800	<i>Dytilum</i> sp.	80
<i>Diplopsalis</i> sp.	800	<i>Guinardia</i> sp.	520
<i>Karenia</i> sp.	560	<i>Hemiaulus</i> sp.	240
<i>Gonyaulax</i> sp.	160		
<i>Tripos fusus</i>	2,720		
<i>Pseliodinium fusus</i>	840		
<i>Oxhyphysis</i> sp.	2,960		

<i>Podolampas</i> sp.	120		
<i>Phalacroma</i> sp.	200		
<i>Pyrophacus</i> sp.	80		
<i>Akashiwo sanguinea</i>	160		
<i>Dinophysis caudata</i>	200		
<i>Tripos divarcatius</i>	80		
<i>Oxytoxum cf. laticep</i>	200		
<i>Tripos candelabrus</i>	40		
		Total	284,080

Table A.4. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in March 23th 2022, at station B8 (Event C5). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]	Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Others	
<i>Ceratium furca</i>	35,880	<i>Bacteriastrum</i> sp.	40
<i>Dinophysis acuminata</i>	80	<i>Ceratulina pelágica</i>	400
<i>Dinophysis caudata</i>	40	<i>Chaetoceros</i> sp.	360
<i>Gonyalaux</i> sp.	560	<i>Dictyocha fibula</i>	160
<i>Gymnodinium</i> sp.	1,320	<i>Guinardia</i> sp.	2,880
<i>Lingulodinium polyedra</i>	169,480	<i>Licmophora</i> sp.	40
<i>Oxhyphysis</i> sp.	80	<i>Nitzschia</i> sp.	8,240
<i>Phalacroma</i> sp.	120	<i>Pseudonitzschia</i> sp.	1,240
<i>Prorocentrum gracile</i>	19,720	<i>Rhizosolenia</i> sp.	120
<i>Prorocentrum micans</i>	13,520	<i>Thalassionema</i> sp.	40
<i>Prorocentrum rostratum</i>	160		
<i>Protoperidinium</i> sp.	120		
<i>Protoperidinium divergens</i>	4,400		
<i>Pyrophacus</i> sp.	40		
<i>Tripos divarcatius</i>	400		
<i>Tripos fusus</i>	120		
		Total	259,560

Table A.5. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in June 24th 2022, at station B6 (Event C6). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]	Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Others	
<i>Akashiwo sanguinea</i>	400	<i>Dictyocha</i> sp.	720
<i>Ceratium furca</i>	4,120	<i>Octactis</i> sp.	40
<i>Cochlodinium</i> sp.	42,240	<i>Navicula</i> sp.	80
<i>Dinophysis acuminata</i>	440	<i>Nitzschia</i> sp.	1,160
<i>dinophysis caudata</i>	600	<i>Haslea wawriake</i>	2,480
<i>Diplopsalis</i> sp.	80	<i>Pseudo-nitzschia</i>	10,560
<i>Gounyalaux</i> sp.	640	<i>Grammatophora</i> sp.	80
<i>Gymnodinium</i> sp.	14,280	<i>Guinardia</i> sp.	640
<i>Gyrodinium</i> sp.	7,040	<i>Coscinodiscus</i> sp.	400
<i>Heterocapsa</i> sp.	40		
<i>Kapelodinium</i> sp.	120		
<i>Karenia</i> sp.	560		
<i>Lingulodinium polyedra</i>	37,640		
<i>Oxytoxum laticep</i>	1,200		
<i>Oxytoxum</i> sp.	800		
<i>Oxytoxum sceptrum</i>	80		
<i>Oxyphysis</i> sp.	840		
<i>Phalacroma</i> sp.	120		
<i>Polykrikos</i> sp.	560		
<i>Prorocentrum gracile</i>	8,680		
<i>Prorocentrum micans</i>	15,240		
<i>Prorocentrum rostratum</i>	8,960		
<i>Protoperdinium divergens</i>	280		
<i>Protoperidinium</i> sp.	160		
<i>Protoperidinium cassum</i>	440		
<i>Pyrophacus</i> sp.	360		
<i>Scrippsiella</i> sp.	440		
<i>Tripes candelabrum</i>	40		
<i>Tripes divarcatius</i>	2,920		
<i>Tripes fusus</i>	2,520		
<i>Tripes macroceros</i>	80		
		Total	168,080

Table A.6. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in April 20th 2023, at station B9 (Event C7). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]	Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Bacillariophyta	
<i>Ceratium divaricatos</i>	6,600	<i>Chaetoceros</i> sp.	2,600
<i>Ceratium furca</i>	4,000	<i>Coscinodiscus</i> sp.	100
<i>Ceratium fusus</i>	9,500	<i>Dytilum</i> sp.	200
<i>Ceratium lineatum</i>	200	<i>Guinardia</i> sp.	1,000
		<i>Lauderia</i> sp.	300
<i>Cochlodinium fulvescens</i>	270,100	<i>Lioloma pacificum</i>	200
<i>Dinophysis</i> sp.	7,600	<i>Pseudo-nitzschia</i>	59,500
<i>Dinophysis caudata</i>	1,200	<i>Thalassionema</i> sp.	500
<i>Diplopsalis</i> sp.	200		
<i>Gonyaulax</i> sp.	2,600		
<i>Gymnodinium</i> sp.	136,000		
<i>Gyrodinium</i> sp.	135,900		
<i>Lingulodinium polyedra</i>	86,300		
<i>Phalacroma</i> sp.	1,300		
<i>Polikrykos</i> sp.	1,700		
<i>Prorocentrum gracile</i>	46,300		
<i>Prorocentrum micans</i>	848,000		
<i>Protoperidinium</i> sp.	2,300		
<i>Protoperidinium cassum</i>	5,400		
<i>Pyrocystis lunula</i>	200		
<i>Scrippsiella</i> sp.	8,400		
		Total	1,638,200

Table A.7. Phytoplankton cell abundance by genera and species observed by microscopy in April 20th 2023, at station B10 (Event C8). In bold is indicated the most abundant taxa.

Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]	Genus/Species	Abundance [Cells L ⁻¹]
Dinophyta		Bacillariophyta	
<i>Ceratium divaricatos</i>	800	<i>Chaetoceros</i> sp.	2,900
<i>Ceratium furca</i>	10,000	<i>Coscinodiscus</i> sp.	200
<i>Ceratium fusus</i>	125,900	<i>Guinardia</i> sp.	600
<i>Cochlodinium fulvescens</i>	303,900	<i>Lioloma pacificum</i>	500

<i>Dinophysis</i> sp.	12,500	<i>Navicula</i> sp.	500
<i>Diplopsalis</i> sp.	400	<i>Pseudo-nitzschia</i>	71,100
<i>Gonyaulax</i> sp.	4,100	<i>Rhizosolenia</i> sp.	300
<i>Gymnodinium</i> sp.	100,600		
<i>Gyrodinium</i> sp.	146,200		
<i>Heterocapsa</i> sp.	100		
<i>Lingulodinium polyedra</i>	148,200		
<i>Oxyphysis</i> sp.	7,300		
<i>Oxytoxum</i> sp.	1,900		
<i>Phalacroma</i> sp.	1,500		
<i>Polikrykos</i> sp.	800		
<i>Prorocentrum gracile</i>	9300		
<i>Prorocentrum micans</i>	887,300		
<i>Protoperidinium</i> sp.	3,300		
<i>Protoperidinium cassum</i>	3,900		
<i>Pyrocystis lúnula</i>	300		
<i>Scripssiella</i> sp.	5,500		
		Total	1,849,900

Material suplementario: Capítulo 2

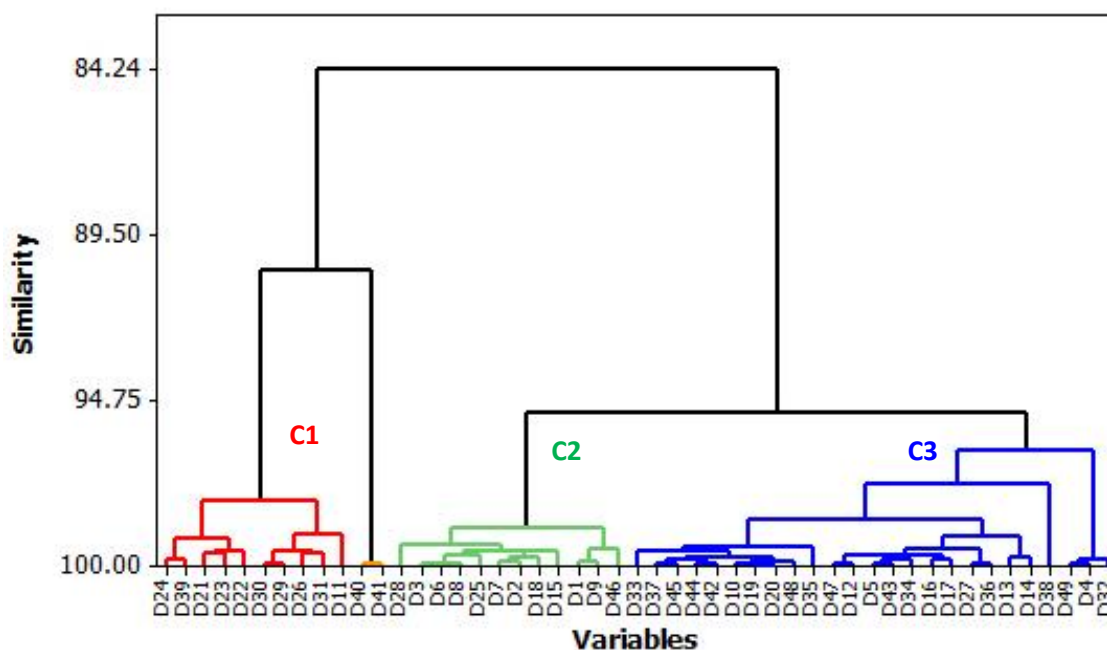


Figure S1. Dendrogram obtained from the Hierarchical Cluster Analysis of $Rrs_TriOS_n(\lambda)$. Variables (D1 to D49) are the code assigned for each measurement. See Table 1 (main document) and table S1 for reference.

Table S1. General information identifying each data used for the Hierarchical Cluster Analysis. *Chla* concentration is in $mg\ m^{-3}$.

Code	Station	Day	Month	Year	Cluster	<i>Chla</i>	Local Time	UTC Time
D1	B4	9	9	2021	C1	1.21	13:14	20:14
D2	B6	9	9	2021	C2	0.87	14:48	21:48
D3	B2	9	9	2021	C2	1.09	11:23	18:23
D4	B2	1	10	2021	C3	0.23	10:48	17:48
D5	B4	1	10	2021	C2	0.61	12:15	19:15
D6	B6	1	10	2021	C2	1.12	13:07	20:07
D7	B2	28	10	2021	C2	1.41	10:30	17:30
D8	B4	28	10	2021	C2	0.91	12:10	19:10
D9	B6	28	10	2021	C1	1.80	13:00	20:00
D10	B2	12	11	2021	C3	1.37	10:16	18:16
D11	B6	12	11	2021	C1	10.27	13:05	21:05
D12	B2	3	12	2021	C2	1.83	11:19	19:19
D13	B4	3	12	2021	C2	1.59	13:06	20:06

Code	Station	Day	Month	Year	Cluster	Chla	Local Time	UTC Time
D1	B4	9	9	2021	C1	1.21	13:14	20:14
D2	B6	9	9	2021	C2	0.87	14:48	21:48
D3	B2	9	9	2021	C2	1.09	11:23	18:23
D4	B2	1	10	2021	C3	0.23	10:48	17:48
D14	B6	3	12	2021	C2	2.24	14:11	22:11
D15	B6	12	12	2021	C2	1.14	11:27	19:27
D16	B6	19	12	2021	C2	0.67	10:17	18:17
D17	B6	19	12	2021	C2	0.97	11:03	19:03
D18	B6	19	12	2021	C2	1.03	11:37	19:37
D19	B4	20	1	2022	C3	0.79	12:25	20:25
D20	B6	20	1	2022	C3	0.79	14:45	22:45
D21	B6	23	3	2022	C1	0.45	12:28	20:28
D22	B6	23	3	2022	C1	8.18	13:09	21:09
D23	B6	23	3	2022	C1	2.25	13:50	21:50
D24	B1	24	6	2022	C1	4.32	14:00	21:00
D25	B2	24	6	2022	C2	4.32	13:06	20:06
D26	B6	24	6	2022	C1	7.74	15:00	22:00
D27	B2	11	8	2022	C2	0.77	-	-
D28	B1	11	8	2022	C2	0.26	10:43	17:43
D29	B6	11	8	2022	C1	3.28	11:40	18:40
D30	B1	31	8	2022	C1	4.80	11:00	18:00
D31	B6	31	8	2022	C1	4.25	12:05	19:05
D32	B2	26	10	2022	C3	1.93	11:40	18:40
D33	B1	26	10	2022	C3	0.48	12:26	19:26
D34	B6	26	10	2022	C2	1.01	13:35	20:35
D35	B2	30	11	2022	C3	0.78	11:20	19:20
D36	B6	30	11	2022	C2	0.80	13:49	21:49
D37	B1	30	11	2022	C3	0.89	12:18	20:18
D38	B2	20	4	2023	C3	3.5	09:40	16:40
D39	B6	20	4	2023	C1	3.89	11:34	18:34
D40	B6	20	4	2023	C1	12.35	12:06	19:06
D41	B6	20	4	2023	C1	17.60	12:41	19:41
D42	B2	20	6	2023	C3	0.62	10:16	17:16
D43	B6	20	6	2023	C2	1.09	12:53	19:53
D44	B1	20	6	2023	C3	0.58	11:20	18:20
D45	B2	4	9	2023	C3	0.96	10:11	17:11
D46	B6	4	9	2023	C1	2.47	12:33	19:33
D47	B1	4	9	2023	C2	0.95	11:35	18:35
D48	B2	11	12	2023	C3	0.39	10:04	18:04
D49	B1	11	12	2023	C3	0.27	11:06	19:06

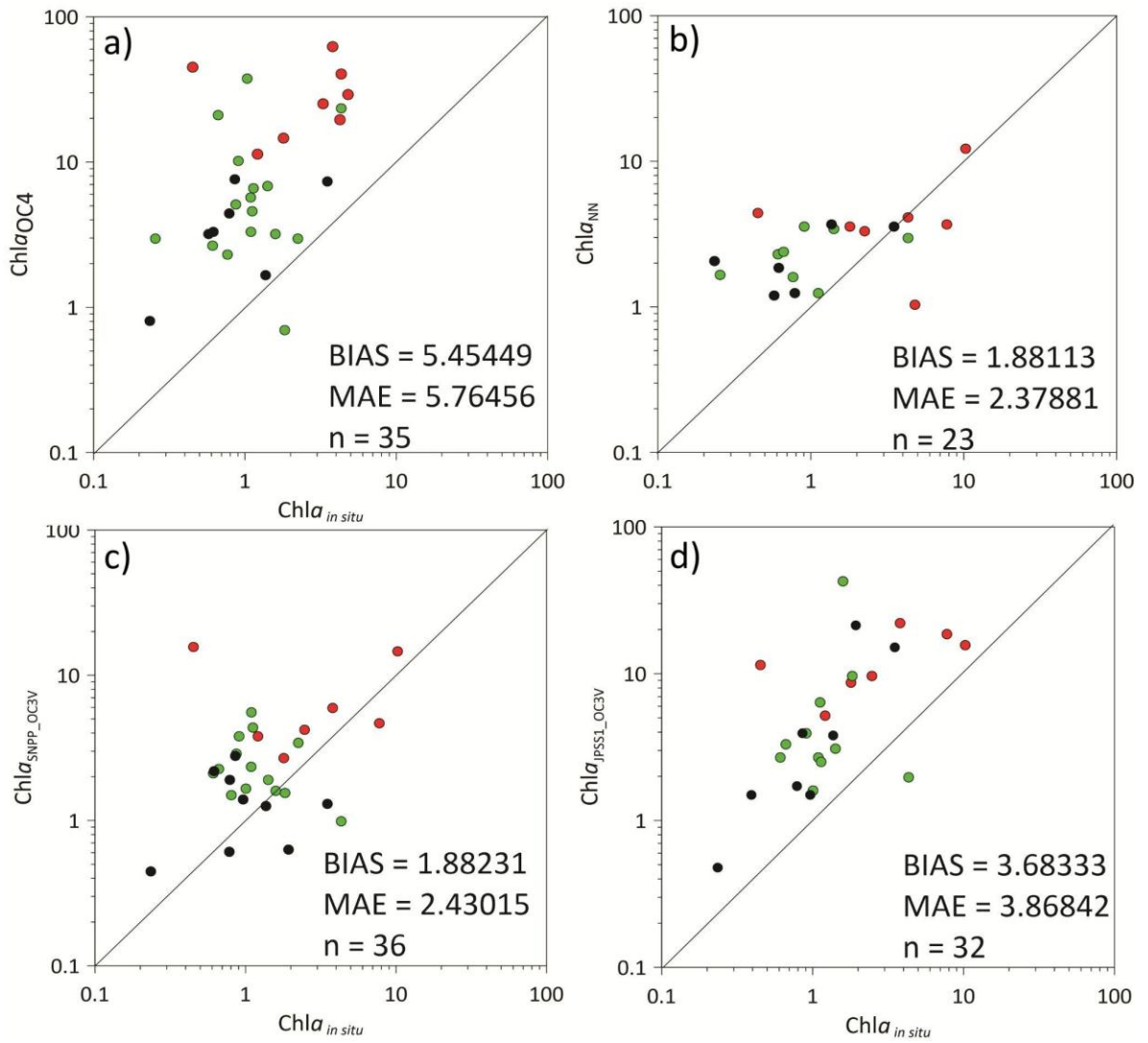


Figure S2. Analysis of scatter plots between *in situ* and OLCI-derived Chla (mg m⁻³) using OC4 algorithm (a) and Neural Network algorithm (b); and VIIRS-derived Chla (mg m⁻³) using OC3V algorithm in SNPP satellite (c) and using OC3V algorithm in JPSS1 satellite (d). Red dots correspond to samples in C1, green dots correspond to C2 and black dots correspond to C3.

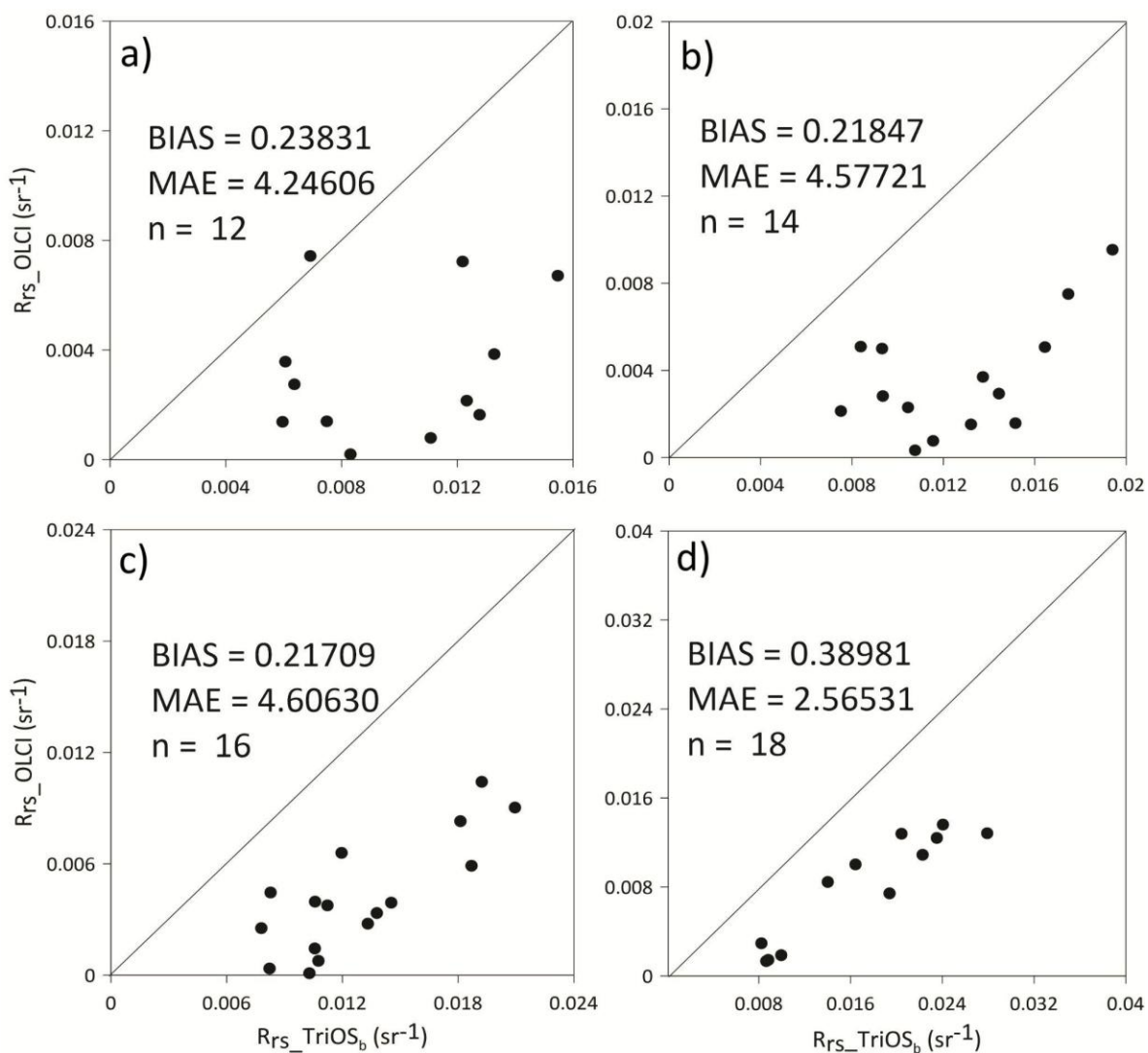


Figure S3. Analysis of scatter plots between $R_{rs_OLCI}(\lambda)$ and $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ for the spectral bands 442 nm (a) 490 nm (b) 510 nm (c) 560 nm (d).

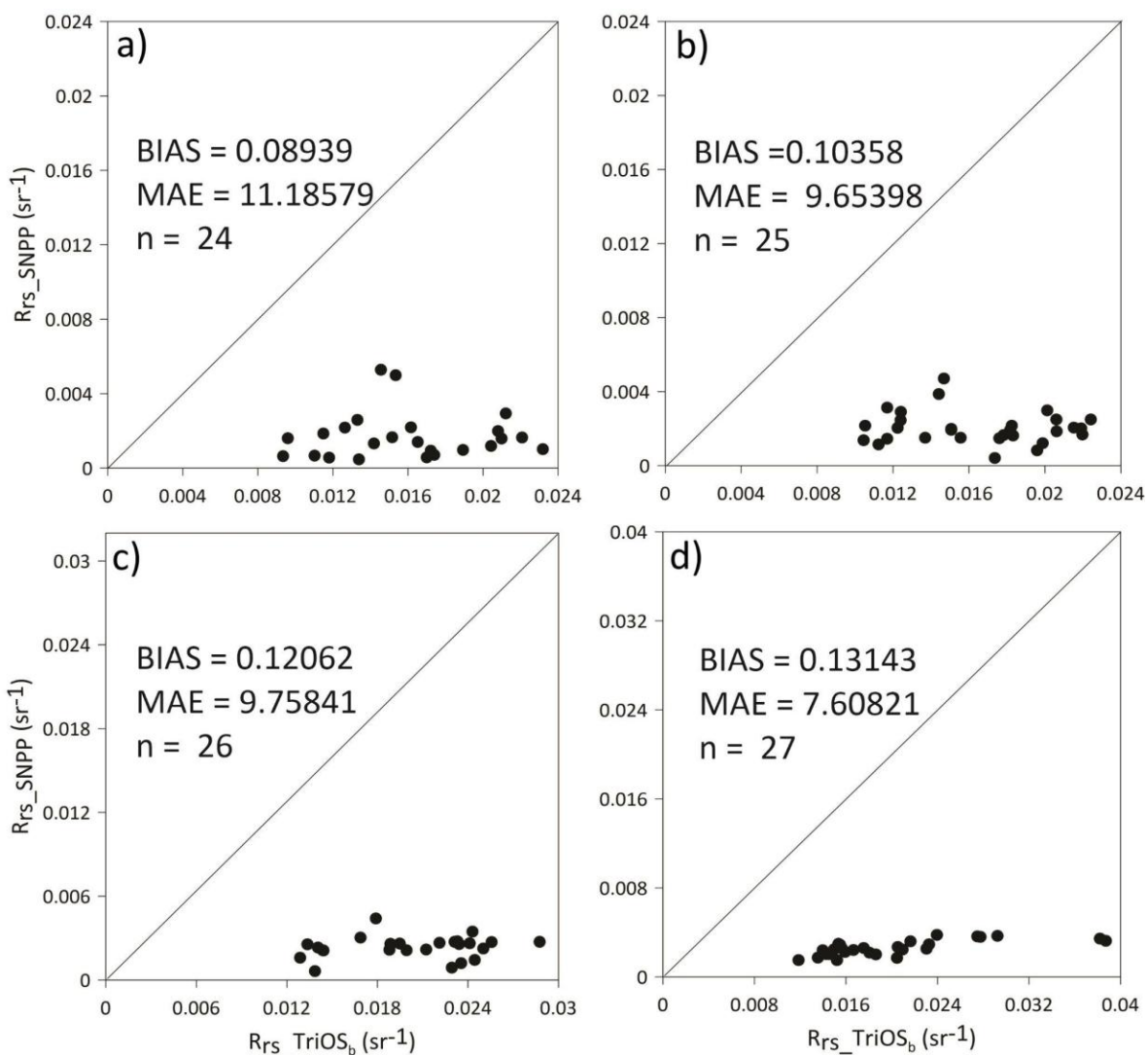


Figure S4. Analysis of scatter plots between $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ and $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ for the spectral bands 410 nm (a) 443 nm (b) 486 nm (c) 551 nm (d).

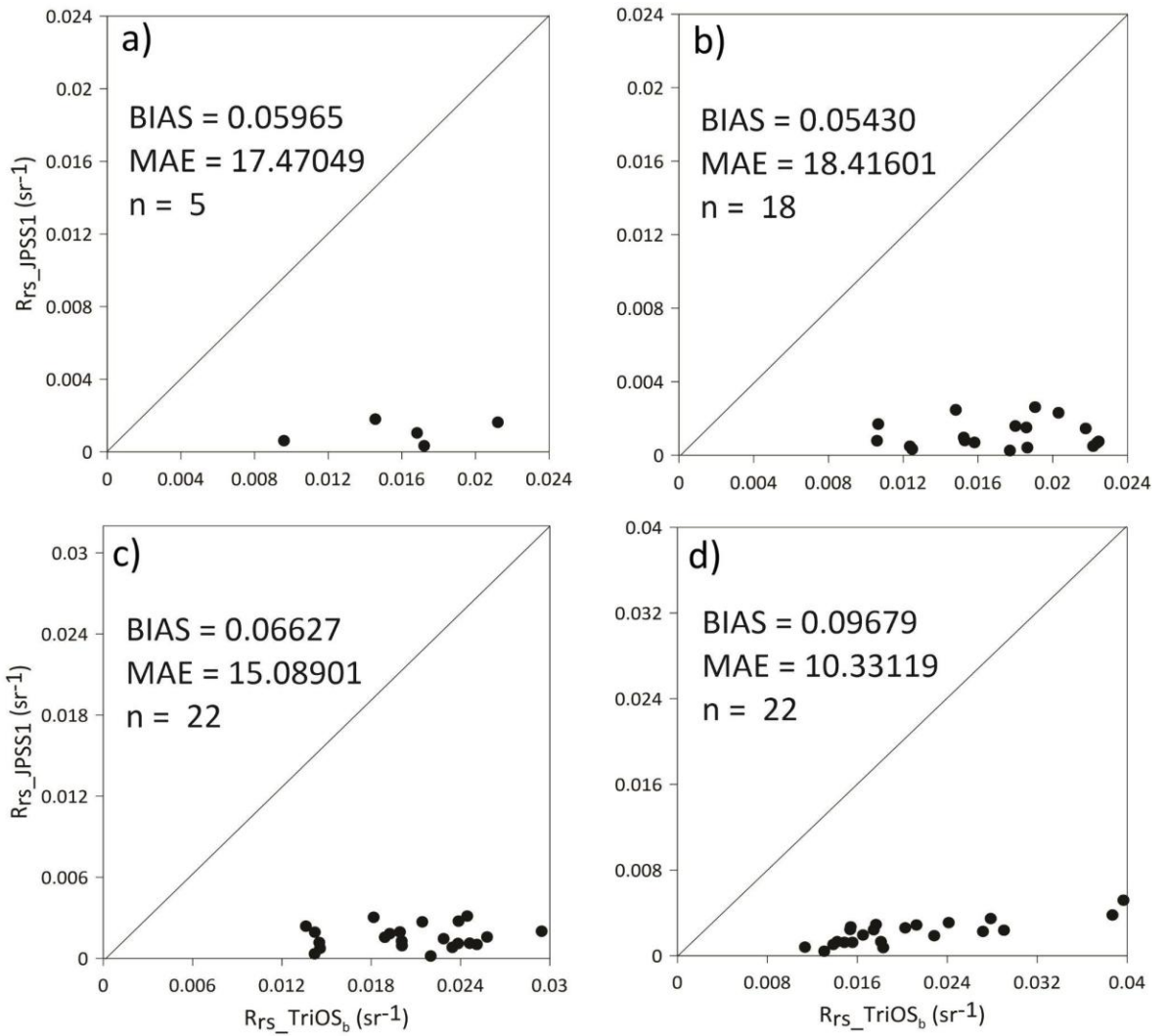


Figure S5. Analysis of scatter plots between $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$ and $R_{rs_TriOS_b}(\lambda)$ for the spectral bands 411 nm (a) 445 nm (b) 489 nm (c) 556 nm (d).

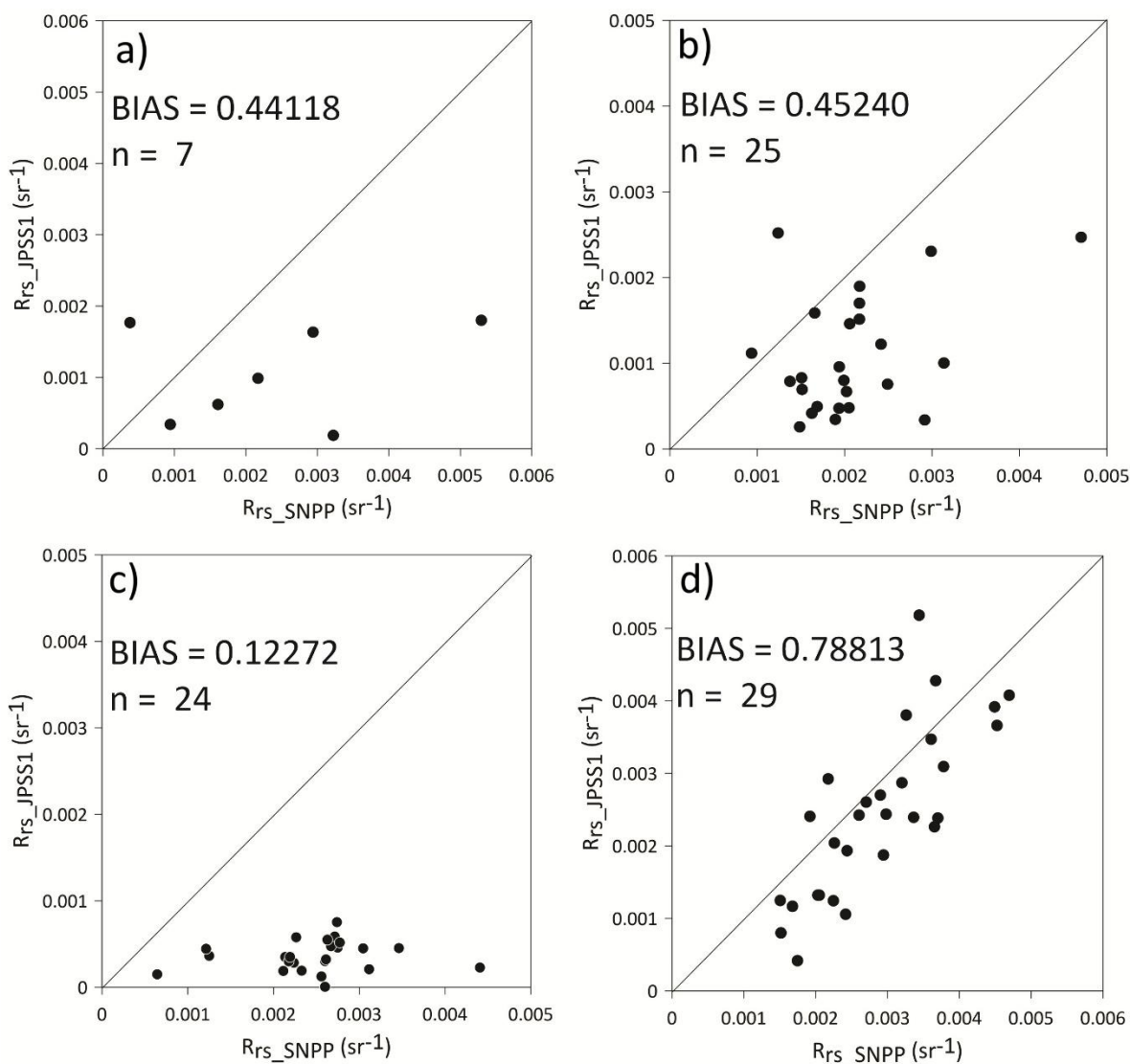


Figure S6. Analysis of scatter plots between $R_{rs_SNPP}(\lambda)$ and $R_{rs_JPSS1}(\lambda)$ for the spectral bands 410 nm (a) 443 nm (b) 486 nm (c) 551 nm (d).

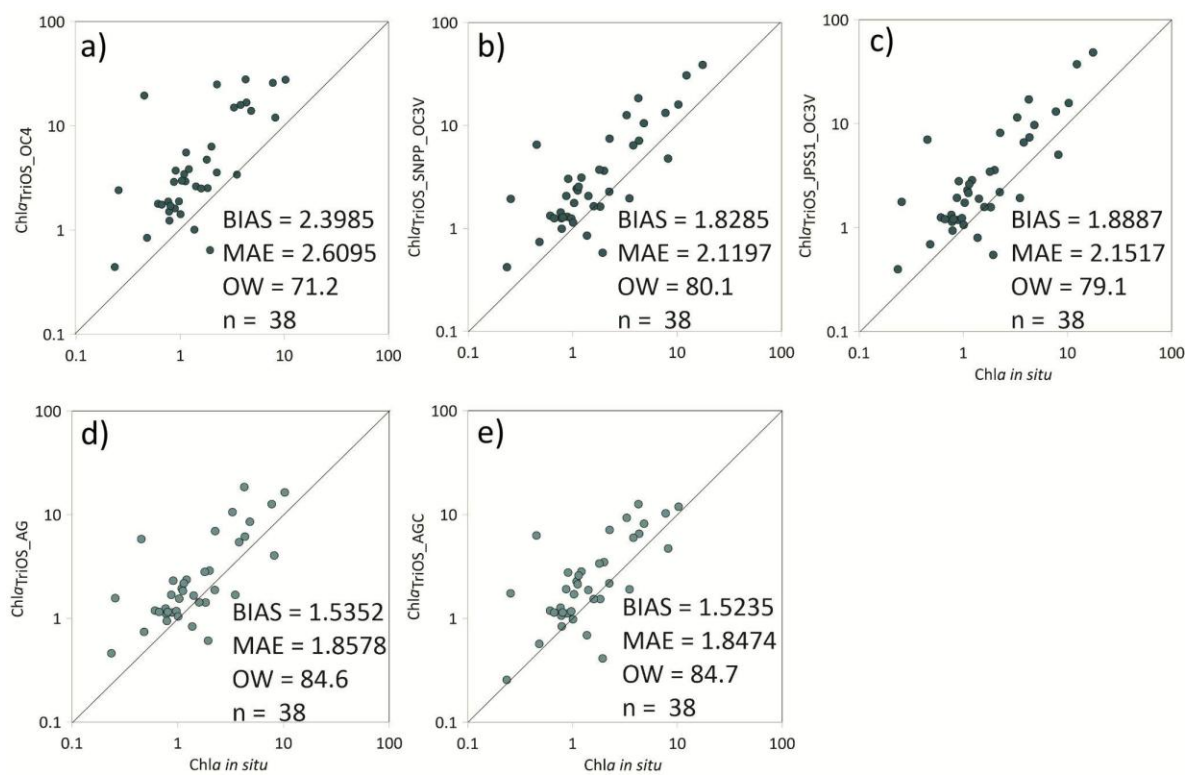


Figure S7. Analysis of scatter plots between *in situ* and Chl_aTriOS_OC4 (mg m⁻³) (a), Chl_aTriOS_SNPP_OC3V (mg m⁻³) (b), Chl_aTriOS_IPSS1_OC3V (mg m⁻³) (c), Chl_aTriOS_AG (mg m⁻³) (d) and finally Chl_aTriOS_AGC (mg m⁻³) (e).