

A statistical approach for modeling shallow (<200 m) temperature profiles in the Pacific Ocean off northwestern Mexico

Un enfoque estadístico para modelar perfiles someros (<200 m) de temperatura en el océano Pacífico en el noroeste de México

Emigdio Marín-Enríquez*

CONACYT–Universidad Autónoma de Sinaloa, Facultad de Ciencias del Mar, Paseo Claussen S/N, 82000, Mazatlán, Sinaloa, Mexico. Tel: 0152(669)9828656

* Corresponding author. E-mail: emarin@uas.edu.mx

ABSTRACT. Temperature is perhaps the most important seawater property. It is a measure of the energy content in the ocean and it affects the metabolic rates, distribution, and abundance of species that are important from the economic and ecological points of view. Satellite-derived oceanographic data have been widely used to assess spatiotemporal variations of sea surface temperature on broad scales; satellites, however, are unable to reach subsurface levels, and obtaining reliable subsurface water temperature data is achieved by either numerical modeling or direct observations, the latter representing a very high-cost alternative. In this paper, a method for modeling temperature profiles is presented. A generalized additive mixed model (GAMM) with a gamma error distribution and an inverse link function was used to model shallow (<200 m) temperature profiles in the Pacific Ocean off northwestern Mexico. The dataset included 656 profiles that were linearly interpolated at depth, which resulted in 127,595 observations. The database covered an area from 18.5° to 25.8°N and from –114.5° to –105.9°W in a time span from June 2007 to November 2016. The model included temperature as response variable; depth, surface dynamic topography, wind stress curl, latitude, longitude, and the Oceanic Niño Index as covariates; and month as random effect. The final model explained 86% of the total deviance of the dataset used to fit the GAMM. Although important deviations between the observations and the predictions of the model were observed, the results of the validation process and of predictions made on an independent dataset (correlation of observed vs. predicted temperature, ~0.93; root-mean-square error, ~1.5 °C) were comparable to the results obtained with more complex modeling techniques, suggesting that this statistical approach is a valuable tool for modeling oceanographic data.

Key words: mixed-effects models, oceanographic campaigns, eastern Pacific Ocean, temperature profiles.

RESUMEN. La temperatura quizá sea la propiedad del agua marina más importante. Es una medida del contenido energético del océano y afecta las tasas metabólicas, la distribución y la abundancia de especies económicamente y ecológicamente importantes. Los datos oceanográficos derivados de satélites han sido utilizados para evaluar las variaciones espaciotemporales de la temperatura superficial del mar a escalas amplias; sin embargo, los satélites no alcanzan niveles subsuperficiales, y los datos de temperatura subsuperficial confiables se obtienen mediante modelamiento numérico u observaciones directas, estas últimas una alternativa costosa. Este artículo presenta un método para modelar perfiles de temperatura. Se utilizó un modelo mixto aditivo generalizado (GAMM, por sus siglas en inglés) con distribución de error gamma y una función de enlace inversa para modelar perfiles someros (<200 m) de temperatura en el Pacífico frente al noroeste de México. Los datos incluyeron 656 perfiles linealmente interpolados en profundidad, resultando en 127,595 observaciones que cubrieron un área de 18.5° a 25.8°N y de –114.5° a –105.9°W, y un periodo de junio de 2007 a noviembre de 2016. El modelo incluyó la temperatura como variable de respuesta; la profundidad, la topografía dinámica superficial, el rotacional del esfuerzo del viento, la latitud, la longitud y el Índice Oceánico de El Niño como covariables; y el mes como efecto aleatorio. El GAMM final explicó el 86% de la desviación total del conjunto de datos. Aunque se observaron importantes desviaciones entre las observaciones y las predicciones del modelo, los resultados del proceso de validación y de las predicciones hechas sobre un conjunto de datos independiente (correlación de temperatura observada vs. temperatura predicha, ~0.93; raíz del error cuadrático medio, ~1.5 °C) fueron comparables a resultados obtenidos con técnicas de modelamiento más complejas, lo cual sugiere que este enfoque estadístico es una herramienta valiosa para modelar datos oceanográficos.

Palabras clave: modelos de efectos mixtos, campañas oceanográficas, océano Pacífico oriental, perfiles de temperatura.

INTRODUCTION

In northwestern Mexico, the Baja California Peninsula (BCP) separates the Pacific Ocean from the Gulf of California (GC), a semi-enclosed sea that is bounded by the coastline of 4 northwestern states: Baja California, Baja California Sur, Sonora, and Sinaloa (Fig. 1). On the west coast of the BCP, the main forcing agent of the large-scale ocean dynamics

INTRODUCCIÓN

En el noroeste de México, la península de Baja California (PBC) separa el océano Pacífico del golfo de California (GC), un mar semicerrado delimitado por las costas de 4 estados del noroeste de México: Baja California, Baja California Sur, Sonora y Sinaloa (Fig. 1). En la costa oeste de la PBC, el principal agente forzante de la dinámica oceánica a gran escala

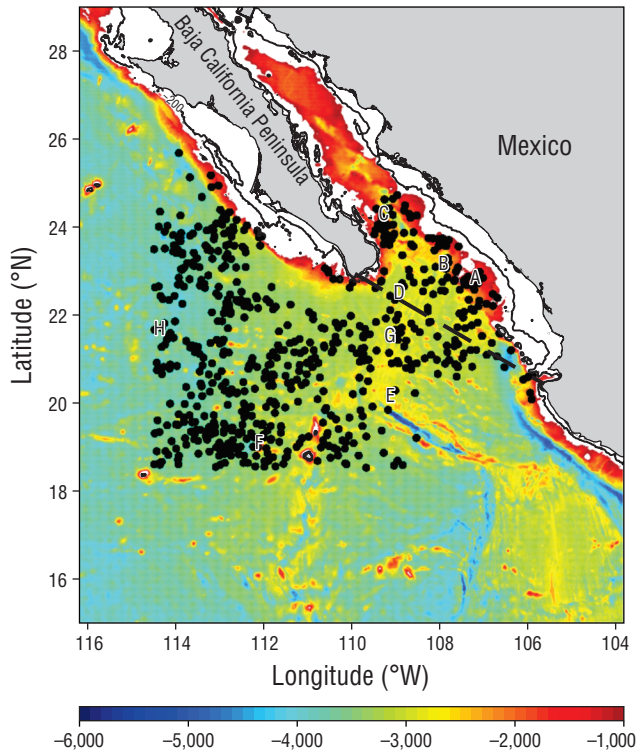


Figure 1. Bathymetry of the entrance to the Gulf of California (in meters). Black dots are the locations of CTD casts used to fit the final generalized additive mixed model. Continuous line depicts the 200-m isobath. Broken line shows the division between the Pacific side (left) and the gulf side (right). The letters correspond to the locations of the randomly extracted CTD casts. The temperature profile that corresponds to each letter is shown in matching panels in Figure 9.

Figura 1. Batimetría de la entrada del golfo de California (en metros). Los puntos negros son las ubicaciones de los lances de CTD utilizados para ajustar el modelo mixto aditivo generalizado final. La línea continua muestra la isóbata de los 200 m. La línea discontinua muestra la división entre el lado del Pacífico (izquierda) y el lado del golfo (derecha). Las letras corresponden a las ubicaciones de los lances de CTD extraídos aleatoriamente. El perfil de temperatura correspondiente a cada letra se muestra en los paneles correspondientes en la Figura 9.

is the California Current, a current that flows from north to south and parallel to the BCP and is characterized by low salinities and low temperatures (Lynn and Simpson 1987, Torres-Orozco 1993). In this zone, intense wind-driven upwelling events occur from April to June as a result of the Ekman transport generated by the trade winds that blow parallel to the BCP (Zaytsev et al. 2003).

On the gulf (eastern) side of the BCP, water masses with high salinity and high temperature are predominant because the GC has a high evaporation rate and is considered an evaporation basin (Castro et al. 1994). At its southern extreme, the GC connects to the Pacific Ocean in a region known as the entrance to the GC; in this zone the cold, nutrient-rich California Current meets the warm, nutrient-poor Mexican

es la corriente de California, una corriente que fluye de norte a sur paralela a la PBC y se caracteriza por bajas salinidades y bajas temperaturas (Lynn y Simpson 1987, Torres-Orozco 1993). En esta área se dan eventos de surgencia generados por el viento de abril a junio como resultado del transporte de Ekman causado por los vientos alisios que soplan paralelos a la PBC (Zaytsev et al. 2003).

En el lado del golfo (oriental) de la PBC, predominan las masas de agua con alta salinidad y alta temperatura, ya que el GC presenta altas tasas de evaporación y es considerado una cuenca de evaporación (Castro et al. 1994). En su extremo sur, el GC se conecta con el océano Pacífico en una región conocida como la entrada del GC; en esta zona, la corriente de California, que es fría y rica en nutrientes, se encuentra con la corriente Costera Mexicana, que es cálida y pobre en nutrientes (Kessler 2006), y se presenta una cadena de remolinos como resultado de la interacción entre el forzamiento del océano Pacífico y la topografía del continente (Zamudio et al. 2008). Debido a estos procesos, se presentan fuertes frentes térmicos en esta zona (Álvarez-Borrego 1983, Marín-Enríquez et al. 2018), por lo que la entrada del GC es una zona interesante tanto desde el punto de vista físico como el de las pesquerías (Torres-Orozco et al. 2005).

Los cruceros oceanográficos son campañas diseñadas, principalmente, para recolectar datos de las propiedades del agua de mar. Entre estas propiedades, la temperatura del agua ha resultado ser de gran interés, ya que representa una medida del contenido energético del océano y la mayoría de procesos físicos y ecológicos están ligados estrechamente a los cambios estacionales y anuales en la temperatura del agua. Adicionalmente, estudios recientes han mostrado que los océanos profundos juegan un papel clave en la regulación de la variabilidad climática de la Tierra (Akbari et al. 2017), así que evaluar el contenido de calor del océano a nivel subsuperficial es una tarea importante.

Los datos oceanográficos de satélites han sido ampliamente utilizados en diferentes disciplinas de las ciencias marinas, ya que proveen información que cubre la mayoría de los océanos del mundo a escalas espaciotemporales muy pequeñas (Yang et al. 2013). En la actualidad, el alcance de los sensores remotos está restringido a la superficie del océano, y no pueden proveer datos oceanográficos a nivel subsuperficial (Fiedler 1988). La comunidad científica, por tanto, depende ya sea de datos de observaciones directas o del modelamiento numérico para obtener datos oceanográficos subsuperficiales (Akbari et al. 2017). Varias aproximaciones de modelamiento han sido utilizadas para modelar la temperatura del océano subsuperficial, entre éstas mínimos cuadrados; regresiones simples, múltiples y no lineales; matrices de regresión; correlaciones simples; e interpolaciones. El lector puede referirse a Akbari et al. (2017) para una revisión completa de las obras publicadas que tratan del modelamiento de las temperaturas oceánicas subsuperficiales.

Los modelos de regresión no lineal son utilizados comúnmente en una variedad de disciplinas científicas, tales

Coastal Current (Kessler 2006) and an eddy train occurs as a product of the interaction between the Pacific Ocean forcing and the mainland topography (Zamudio et al. 2008). Because of these processes, strong thermal fronts occur in the area (Álvarez-Borrego 1983, Marín-Enríquez et al. 2018), making the entrance to the GC an interesting zone from the physical and the fisheries perspectives (Torres-Orozco et al. 2005).

Oceanographic cruises are campaigns designed mainly to collect data on seawater properties. Of those properties, water temperature has proven to be of main interest because it is a measure of the energy content in the ocean and most physical and ecological processes are closely linked to seasonal and year-to-year changes in water temperature. Additionally, recent studies have shown that the deeper oceans play a key role in regulating the Earth's climate variability (Akbari et al. 2017), so assessing the ocean's heat content at the subsurface levels is a very important endeavor.

Satellite-derived oceanographic data have been widely used in the different disciplines of marine science because it provides information that covers most of the world's oceans at very fine spatiotemporal scales (Yang et al. 2013). Currently, the range of remote sensors is restricted to the surface of the ocean, and they cannot provide oceanographic data at subsurface levels (Fiedler 1988). The marine scientific community therefore relies on either direct observations or numerical modeling to obtain subsurface oceanographic data (Akbari et al. 2017). Several different modeling approaches have been used to estimate subsurface ocean temperature, including least squares; simple, multiple, and nonlinear regression; regression matrices; simple correlation; and interpolation. The reader can refer to Akbari et al. (2017) for a complete review on published works that deal with modeling subsurface ocean temperatures.

Nonlinear regression models are commonly used in a wide variety of scientific disciplines, such as fisheries ecology (Su et al. 2008, Zainuddin et al. 2008), health (Yang et al. 2012), and meteorology (Jones et al. 2013). Their use in the oceanography/hydrography disciplines, however, has been scarcely explored, and most published works rely on linear regression (Akbari et al. 2017). The papers by Richards et al. (2010) and Gómez-Ocampo et al. (2017) are of the few published works that used nonlinear regression models and oceanographic data. Using generalized additive models (GAMs) to monitor and standardize water quality parameters and oceanographic data for the coastal zone off Southeast Queensland, Australia, Richards et al. (2010) identified interesting nonlinear relationships between a coastal current and water turbidity, a finding with important implications in the operation of a desalination plant. The authors concluded that the application of GAMs in different research areas is "clearly evident" (Richards et al. 2010). Gómez-Ocampo et al. (2017) used GAMs to model surface chlorophyll concentration and primary productivity as a function of different environmental variables (absolute dynamic topography and Ekman pumping) and suggested that the GAMs produced a

como la ecología pesquera (Su et al. 2008, Zainuddin et al. 2008), la salud (Yang et al. 2012) y la meteorología (Jones et al. 2013). Sin embargo, su utilización en las disciplinas de oceanografía/hidrografía ha sido poco explorada, y la mayoría de los trabajos publicados dependen de regresiones lineales (Akbari et al. 2017). Los trabajos de Richards et al. (2010) y Gómez-Ocampo et al. (2017) son de los pocos trabajos publicados que utilizan modelos de regresión no lineal y datos oceanográficos. Mediante el uso de modelos aditivos generalizados (GAM, por sus siglas en inglés) para monitorear y estandarizar los parámetros de calidad del agua y datos oceanográficos de un área costera frente al sureste de Queensland, Australia, Richards et al. (2010) identificaron relaciones no lineales interesantes entre la corriente costera y la turbidez del agua, lo cual tuvo implicaciones importantes para la operación de una planta desalinizadora. Los autores concluyeron que la aplicabilidad de los GAM en diferentes áreas de investigación es "claramente evidente" (Richards et al. 2010). Gómez-Ocampo et al. (2017) utilizaron un GAM para modelar la concentración de clorofila superficial y la productividad primaria como función de diferentes variables ambientales (topografía dinámica absoluta y bombeo de Ekman) y sugirieron que el GAM produjo un mejor ajuste en comparación con otras técnicas de modelamiento para predecir la clorofila y la productividad primaria.

El principal objetivo del presente artículo fue explorar los modelos de regresión no lineal como herramientas alternativas a los modelos determinísticos más complejos que son tradicionalmente utilizados para generar perfiles de temperatura, y evaluar cómo los perfiles de temperatura predichos con modelos de regresión no lineal se desvían de las observaciones *in situ* y de los perfiles generados con modelos hidrodinámicos. Aquí se muestra que por lo menos el 90% de la variación en los perfiles de temperatura en los primeros 200 m puede ser explicado por un modelo de regresión no lineal que incluye variables como indicadoras de la variación de mesoescala, estacional e interanual (topografía dinámica de la superficie del mar); el transporte vertical de agua (el rotacional del esfuerzo del viento); un componente interanual (Índice Oceánico de El Niño); un término aleatorio (el mes); y componentes espaciales (latitud y longitud). Aunque los resultados del modelo de regresión no lineal final que se presentan aquí se desvían de las observaciones *in situ* y de los perfiles generados utilizando modelos hidrodinámicos, este artículo podría servir como línea de base para trabajos científicos que busquen utilizar modelos de regresión no lineal para modelar diferentes propiedades del agua de mar, un campo de investigación virtualmente inexplorado.

MATERIALES Y MÉTODOS

Datos

Los datos de perfiles de temperatura fueron obtenidos del Programa de Perfil Global de Temperatura y Salinidad

better fit when compared to other modeling approaches to predict chlorophyll and primary productivity.

The main objective of this paper is to explore nonlinear regression models as an alternative to the more complex deterministic models that are traditionally used to generate temperature profiles, and to assess how the temperature profiles predicted with nonlinear regression models deviate from *in-situ* observations and from profiles generated by hydrodynamic models. Here, it is shown that at least 90% of the variation of temperature profiles in the upper 200 m can be explained by a nonlinear regression model that includes variables as proxies of the mesoscale, seasonal, and interannual variation (sea surface dynamic topography); vertical water transport (wind stress curl); an interannual component (Oceanic Niño Index); a random term (month); and spatial (latitude, longitude) components. Although the results of the final nonlinear regression model presented here deviate from the *in-situ* observations and from the profiles generated using hydrodynamic models, the present paper could provide a baseline for scientific works that seek to use nonlinear regression to model different seawater properties, a research field that is virtually unexplored.

MATERIALS AND METHODS

Data

Temperature profile data were obtained from the Global Temperature and Salinity Profile Programme (GTSP), available from the Environmental Research Division's Data Access Program (ERDDAP) server of the US National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) (Simmons 2017; dataset ID: erdGtspBest). The dataset included day, month, year, longitude, latitude, temperature, and salinity for depths of 1 to 2,013 m, covering an area from -114.5° to -105.9° W and 15.5° to 25.8° N (Fig. 1) and a timeframe from June 2007 to November 2016. Only data for the first 200 m of the water column were used, because (1) that's where most of the temperature vs. depth variation occurs (thermocline, mixed layer) (Fiedler and Talley 2006) and (2) most commercially important fisheries (tunas, sardines, billfish) occur within those depths, in the epipelagic zone (Holland et al. 1990, Emmett et al. 2005, Torres-Orozco et al. 2005).

A thorough exploratory analysis of the data was performed. A common issue with this type of dataset is that temperature is not measured in uniform depth intervals (probably due to different study designs or technical equipment differences). In the particular case of this dataset, depth intervals ranged from 1 to 42 m; of these, ~90% of temperature profiles were recorded in depth intervals of <10 m, and 36% in depth intervals of 1 m. Linear interpolation was performed to ensure that all profiles had $Z_{\max} - Z_{\min}$ observations (i.e., a profile in which the conductivity, temperature, depth [CTD] sensor started to measure temperature at 5 m and ended at 195 m would have $195 - 5 = 190$ observations after

(GTSP, por sus siglas en inglés), disponible en el servidor del Programa de Acceso de Datos de la División de Investigación Ambiental (ERDDAP, por sus siglas en inglés) de la Oficina Nacional de Administración Oceánica y Atmosférica (NOAA) de los Estados Unidos (Simmons 2017; dataset ID: erdGtspBest). Los datos incluyeron el día, el mes, el año, la longitud, la latitud, la temperatura y la salinidad a profundidades desde 1 hasta 2,013 m, en un área que cubrió de -114.5° a -105.9° W y de 15.5° a 25.8° N (Fig. 1), entre junio de 2007 y noviembre de 2016. Solo los datos de los primeros 200 m de la columna de agua fueron utilizados porque a estas profundidades ocurre (1) la mayoría de la variación de temperatura vs. profundidad (termoclina, capa de mezcla) (Fiedler y Talley 2006) y (2) la mayoría de las pesquerías de importancia comercial (atunes, sardinas y picudos), en la zona epipelágica (Holland et al. 1990, Emmett et al. 2005, Torres-Orozco et al. 2005).

Se llevó a cabo un análisis exploratorio riguroso de los datos. Un problema común con este tipo de conjunto de datos es que la temperatura no es medida a intervalos de profundidad uniformes (probablemente debido a diferentes diseños de los estudios o a diferencias técnicas en el equipo). En el caso particular de este conjunto de datos, los intervalos de profundidad abarcaron de 1 a 42 m; de estos, el ~90% de los perfiles de temperatura fueron registrados a intervalos de <10 m, y el 36% a intervalos de 1 m. Se llevaron a cabo interpolaciones lineales para asegurarse de que todos los perfiles tenían observaciones $Z_{\max} - Z_{\min}$ (i.e., un perfil en el que la sonda de conductividad, temperatura y profundidad [CTD] empezó a medir la temperatura a los 5 m y terminó a los 195 m tendría $195 - 5 = 190$ observaciones luego de la interpolación). La interpolación de la base de datos resultó en 127,595 observaciones de temperatura.

Según Godínez et al. (2010) la dinámica estacional, interanual y de mesoescala tiene casi igual importancia a la hora de determinar la circulación de la superficie del mar en el área de estudio (35%, 35% y 30%, respectivamente). Para considerar las variaciones estacionales, se incluyó el mes como variable de efecto aleatorio, y para considerar la variabilidad anual en los perfiles de temperatura, se utilizó el índice oceánico de El Niño (ONI), ya que la variabilidad interanual de la circulación en la entrada del GC está dominada por El Niño/Oscilación del Sur (ENOS) (Godínez et al. 2010). El ONI se calcula como la anomalía mensual de los datos de temperatura superficial del mar a partir de un área rectangular cercana al ecuador (5° S a 5° N y 120° a 170° W) conocida como región El Niño 3.4. Los datos del ONI para el mismo periodo que la base de datos del CTD (2007–2017) fueron obtenidos del Centro de Predicciones Climáticas de la NOAA (http://origin.cpc.ncep.noaa.gov/products/analysis_monitoring/ensostuff/ONI_v5.php).

Por otra parte, la topografía dinámica de la superficie del mar (TDSM) fue utilizada como *proxy* de la variabilidad de mesoescala, interanual y estacional en la variación de la temperatura vs. de la profundidad. Los datos de TDSM

interpolation). Interpolating the database resulted in 127,595 temperature observations.

According to Godínez et al. (2010) the seasonal, interannual, and mesoscale dynamics are almost equally important to determinate the sea surface circulation in the study area (35%, 35%, and 30%, respectively). To account for seasonal variation, month was included as a random effects variable, and to account for year-to-year variability in temperature profiles, the Oceanic Niño Index (ONI) was used because the interannual variability of the circulation at the entrance to the GC is dominated by El Niño/Southern Oscillation (ENSO) (Godínez et al. 2010). ONI is calculated as the monthly anomaly of the sea surface temperature data from a rectangular area near the equator (5° S to 5° N and 120° to 170° W) known as El Niño 3.4 region. ONI data for the same period as the CTD database (2007–2017) were obtained from NOAA's Climate Prediction Center (http://origin.cpc.ncep.noaa.gov/products/analysis_monitoring/ensostuff/ONI_v5.php).

On the other hand, the sea surface dynamic topography (SSDT) was used as a proxy to account for the mesoscale, interannual, and seasonal variability in the temperature vs. depth variation. Data for SSDT were obtained from the Copernicus Marine Environmental Monitoring Service (<http://marine.copernicus.eu/>) for the 2006–2017 period, with a monthly temporal resolution and a $0.08^\circ \times 0.08^\circ$ spatial resolution. To account for the temperature vs. depth variation associated with vertical water transport, wind data were also extracted from Copernicus; the wind database had a monthly temporal resolution and a 0.25° spatial resolution. Including wind in regression-based models is not a trivial task, because (unlike temperature and SSDT) wind is a vector quantity. Because wind data were used as a proxy for vertical transport, the wind stress curl (WSC) was included as a predictor variable in the statistical modeling process. WSC was calculated from the wind data using the following equation:

$$\text{WSC} = \frac{\partial \tau_y}{\partial x} - \frac{\partial \tau_x}{\partial y} \quad , \quad (1)$$

where $\partial \tau_y$ and $\partial \tau_x$ are, respectively, the meridional and zonal changes of the wind stress τ , and ∂_x and ∂_y are the size of the pixels (0.25°) of the wind database.

Wind stress τ was calculated using the empirical equations proposed by Large and Pond (1981):

$$\tau = C_D \times \rho_{air} \times U^2 \quad , \quad (2)$$

where C_D is a dimensionless drag coefficient (1.2×10^{-3}), ρ_{air} is the density of air ($1.22 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$), and U is the wind speed at 10 m above sea surface. WSC was calculated using the *curl* function of R's *oce* package v.1.2-0 (Kelley and Richards 2017).

Because neither the nodes of the SSDT nor the wind grids exactly matched the coordinates of the CTD casts of the GTSP database, the closest point of the SSDT and the wind

fueron obtenidos del Servicio de Monitoreo Atmosférico Copernicus (<http://marine.copernicus.eu/>) para el periodo 2006–2017, con una resolución temporal mensual y una resolución espacial de $0.08^\circ \times 0.08^\circ$. Para tomar en cuenta la variación de la temperatura vs. la profundidad asociada con el transporte vertical del agua, también se extrajeron datos de viento de Copernicus; la base de datos del viento tuvo una resolución temporal mensual y una resolución espacial de 0.25° . Incluir el viento en los modelos basados en regresiones no es una tarea trivial porque, a diferencia de la temperatura y la TDSM, el viento es una cantidad vectorial. Ya que los datos del viento fueron utilizados como indicadores del transporte vertical, el rotacional del esfuerzo del viento (WSC, por sus siglas en inglés) fue incluido como una variable predictiva en el proceso de modelamiento estadístico. El WSC fue calculado a partir de datos del viento utilizando la siguiente ecuación:

$$\text{WSC} = \frac{\partial \tau_y}{\partial x} - \frac{\partial \tau_x}{\partial y} \quad , \quad (1)$$

donde $\partial \tau_y$ y $\partial \tau_x$ son los cambios meridional y zonal, respectivamente, del esfuerzo del viento τ ; y ∂_x y ∂_y son el tamaño de los pixeles (0.25°) de la base de datos del viento.

El esfuerzo del viento τ fue calculado utilizando las ecuaciones empíricas propuestas por Large y Pond (1981):

$$\tau = C_D \times \rho_{aire} \times U^2 \quad , \quad (2)$$

donde C_D es un coeficiente de resistencia adimensional (1.2×10^{-3}), ρ_{aire} es la densidad del aire ($1.22 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$) y U es la velocidad del viento a 10 m por encima de la superficie del mar. WSC fue calculado utilizando la función *curl* del paquete *oce* en el programa R v.1.2-0 (Kelley y Richards 2017).

Ya que ni los nódulos de la TDSM, ni las cuadrículas del viento correspondían exactamente a las coordenadas de los lances de CTD de la base de datos GTSP, el punto más cercano de la TDSM y de la cuadrícula del viento a cada ubicación de lance de CTD (para el mes/año correspondiente en que se llevó a cabo el lance de CTD) fue utilizado como *proxy* de la TDSM y del viento para cada una de las 656 ubicaciones de los lances de CTD. Esto se logró escribiendo una función en el entorno R para calcular la distancia entre la ubicación de cada lance de CTD y cada uno de los nódulos de la cuadrícula de la TDSM, y extraer las coordenadas de la cuadrícula más cercanas a la ubicación de cada lance de CTD.

Profundidad de la termoclina

La profundidad de la termoclina es una de las variables más importantes en la hidrografía, porque los cambios en esta variable son responsables de numerosos procesos biológicos, físicos, químicos y ecológicos. Para evaluar la capacidad del modelo de reproducir los perfiles de temperatura, la profundidad de la termoclina tanto de las observaciones

grid to each CTD cast location (for the corresponding month/year when the CTD cast was carried out) was used as a proxy of SSTD and wind for each of the 656 locations of the CTD casts. This was accomplished by writing a function in the R environment that calculates the distances between the locations of each CTD cast and each of the nodes of the SSTD grid, and returns the coordinates of the grid that are closest to the location of each CTD cast.

Thermocline depth

Thermocline depth is one of the most important variables in hydrography because changes in this variable are responsible for numerous biological, physical, chemical, and ecological processes. In order to assess the model's capacity to reproduce the temperature profiles, the thermocline depth of the observations and the predictions made by the model was calculated according to Fiedler and Talley (2006), who suggested that thermocline is the depth where the maximum value of dT/dZ occurs.

Statistical modeling

A generalized additive mixed model (GAMM) was used to model the relationship between temperature and depth, SSTD, WSC, latitude, longitude, and ONI. GAMMs are extensions of the classical linear regression model, but the 2 approaches differ by 3 main characteristics. First, unlike linear regression models, GAMMs can incorporate different error distributions (other than Gaussian). Second, GAMMs are capable of dealing with nonlinear relationships between the response and the independent variables in a semiparametric manner (Maunder and Punt 2004). The degree of "how nonlinear" the relationship is between the response variable and any covariate is quantified by the effective degrees of freedom (EDF), with $EDF = 1$ depicting a linear relationship and $EDF > 1$ depicting some degree of nonlinearity (Wood 2006). Third, GAMMs can incorporate a random effect component, which is useful when the heterogeneity of variances assumption is violated. The decision of using a gamma distribution for the error was based on the following: (1) the histogram of the response variable (temperature) was skewed to the left (non-normal appearance), (2) gamma distribution can be used for continuous positive variables (such as temperature), and (3) gamma distribution is capable of dealing with data with reasonable amount of spread at the expense of the estimation of an extra parameter (Zuur et al. 2009).

Because the oceanographic features that distribute the water masses in the study area are different on the Pacific and gulf sides of the BCP, a "Region" variable was nested in the model. "Region" is a categorical variable with 2 levels: gulf and Pacific. The division between the gulf and Pacific areas was made according to Lavín and Marinone (2003), who suggested that the gulf is separated from the Pacific Ocean by an imaginary line from Cabo San Lucas, in the

como de las predicciones hechas con el modelo fue calculada según Fiedler y Talley (2006), quienes sugirieron que la termocline es la profundidad donde se presenta el valor máximo de dT/dZ .

Modelamiento estadístico

Un modelo mixto aditivo generalizado (GAMM, por sus siglas en inglés) fue utilizado para modelar la relación entre la temperatura y la profundidad, la TDSM, el WSC, la latitud, la longitud y el ONI. Los GAMM son extensiones del modelo de regresión lineal clásico, pero los 2 enfoques difieren en 3 características principales. Primero, a diferencia del modelo de regresión lineal, los GAMM pueden incorporar diferentes distribuciones de error (diferentes a la Gaussiana). Segundo, los GAMM pueden lidiar con relaciones no lineales entre las variables de respuesta y las variables independientes en una forma semiparamétrica (Maunder y Punt 2004). Qué tan "no lineal" es la relación entre la variable de respuesta y cualquier covariable es cuantificado por los grados de libertad efectivos (GLE): cuando $GLE = 1$, la relación es lineal; cuando $GLE > 1$, hay un cierto grado de no linealidad (Wood 2006). Tercero, los GAMM pueden incorporar un componente de efecto aleatorio, lo cual es útil cuando se violan los supuestos de heterogeneidad de las varianzas. La decisión de utilizar una distribución gamma para el error se basó en lo siguiente: (1) el histograma de la variable de respuesta (temperatura) estuvo sesgado hacia la izquierda (apariencia no normal), (2) la distribución gamma puede ser utilizada para variables continuas y positivas (como la temperatura) y (3) la distribución gamma puede lidiar con una dispersión razonable a expensas de tener que estimar un parámetro extra (Zuur et al. 2009).

Ya que las características oceanográficas que distribuyen las masas de agua en el área de estudio son diferentes en el lado del Pacífico y en el lado del golfo de la PBC, una variable "Región" fue anidada en el modelo. "Región" fue una variable categórica con 2 niveles: golfo y Pacífico. La división entre las áreas golfo y Pacífico se hizo según Lavín y Marinone (2003), quienes sugirieron que el golfo está separado del océano Pacífico por una línea imaginaria que va de cabo San Lucas, en la PBC, a cabo Corrientes, en el estado mexicano de Jalisco (Ver Fig. 1). El anidamiento de la variable "Región" se logró al configurar el argumento "by" de la función *gamm* de *mgcv* (Wood 2006) a "Región" (by = Región) en R (R Core Team 2016), logrando así que se ajustara una curva a los perfiles de cada lado del área de estudio (Wood 2006). La variable anidada "Región" fue incluida en todas las variables predictoras, con la excepción del ONI, ya que los datos del ONI sólo pueden ser utilizados como indicadores de la variabilidad temporal (no espacial) de un año a otro.

Para evaluar la importancia relativa de cada covariable, se utilizó un modelamiento paso a paso. En este enfoque, se añade una variable a la vez, y se evalúa su importancia por

BCP, to Cabo Corrientes, in the Mexican state of Jalisco (See Fig. 1). Nesting of the “Region” variable was accomplished by setting the argument of the *gamm* function of *mgcv* (Wood 2006) in R to “Region” (by = Region) (R Core Team 2016), ensuring that one curve was fitted for the profiles on either side of the study area (Wood 2006). The nested “Region” variable was included in all the predictor variables, with the exception of ONI, because ONI data can account only for temporal (not spatial) year-to-year variability.

To assess the relative importance of each variable, a stepwise modeling approach was used. In this approach, each single covariate is added at a time, and its degree of importance is assessed with the percentage of explained deviance. The decision on when to retain or drop a covariate from the GAMM was based on the Akaike information criterion (AIC), and any variable that resulted in a decrease of at least 2 units in the AIC was retained in the model (Burnham and Anderson 2002). When the effect of 2 variables together differs from the sum of their separate effects, using interaction terms is a useful approach (Wood 2006). The interaction term between longitude and latitude was included to account for the spatial setting, a procedure that is commonly used in spatially explicit statistical modeling (see, for example, Su et al. 2008 and Marín-Enríquez et al. 2018). A common problem in regression-based statistical models arises when 2 or more of the covariates are correlated to each other. To minimize the potential bias induced by multicollinearity, a concurvity analysis of the models was performed at each step of the stepwise process. Concurvity can be seen as a non-linear extension of multicollinearity (Wood 2006) and takes values between 0 and 1, with 1 depicting perfect collinearity between any 2 covariates.

Model validation process was divided in 4 parts. First, normality and heterogeneity were assessed using standard analysis of the fitted model’s residuals (histogram of the residuals, scatterplots of residuals vs. independent variables). Second, the model’s potential overfitting and its predictive capacity were tested by applying the fitted model to an independent dataset (a dataset that was not used in the model-fitting process). Predicted vs. observed values for this last part were explored by calculating the root-mean-square error (RMSE) and the Pearson correlation coefficient of the observed vs. predicted temperature data and of the observed vs. predicted thermocline depth for all the profiles of the independent database. For this part, data for 2017 was extracted from the same website from where data used in the fitting process was extracted. Splitting of datasets and predictions made on independent datasets have proven to be a useful tool to assess model overfitting and predictive accuracy of statistical models (Martínez-Rincón et al. 2012, Farrell et al. 2014). Third, to assess possible bias in the final model due to the fact that processes that can regulate temperature profiles on each side of the BCP are somehow different, profiles from both the 2007–2016 (4 profiles for each side) and the 2017 (3 profiles for the gulf side and 2 profiles for the

medio del porcentaje de desviación explicado. La decisión de cuándo mantener o abandonar una covariable del GAMM se basó en el criterio de información de Akaike (CIA), y cualquier variable que dio como resultado una disminución en por lo menos 2 unidades del CIA fue mantenida en el modelo (Burnham y Anderson 2002). Cuando el efecto de 2 variables juntas difiere de la suma de sus efectos separados, el utilizar los términos de interacción es una aproximación útil (Wood 2006). El término de interacción entre longitud y latitud fue incluido para dar cuenta del entorno espacial, un procedimiento comúnmente utilizado en modelamiento estadístico espacialmente explícito (véase, por ejemplo, Su et al. 2008 y Marín-Enríquez et al. 2018). Un problema común en los modelos estadísticos basados en regresión surge cuando 2 o más covariables están correlacionadas entre sí. Para minimizar el sesgo potencial inducido por la multicolinealidad, un análisis de concurvidad de los modelos se llevó a cabo a cada punto del proceso paso a paso. La concurvidad puede ser vista como una extensión no lineal de la multicolinealidad (Wood 2006) y toma valores entre 0 y 1; un valor de 1 refleja una colinealidad perfecta entre cualquier par de covariables.

El proceso de validación del modelo se dividió en 4 partes. Primero, se evaluaron la normalidad y heterogeneidad utilizando los análisis habituales de los residuales del modelo ajustado (histograma de los residuales, diagrama de dispersión de los residuales vs. las variables independientes). Segundo, el sobreajuste potencial y la capacidad predictiva del modelo fueron puestos a prueba al aplicar el modelo ajustado a un conjunto de datos independiente (un conjunto de datos que no fue utilizado en el proceso de ajuste del modelo). Los valores predichos vs. los observados para esta última parte fueron explorados al calcular la raíz del error cuadrático medio (RECM) y el coeficiente de correlación de Pearson de los datos observados vs. predichos de la temperatura y de la profundidad de la termoclina para todos los perfiles de la base de datos independiente. Para esta parte, los datos de 2017 fueron extraídos del mismo sitio web de donde fueron extraídos los datos utilizados en el proceso de ajuste. El separar los conjuntos de datos y las predicciones hechas sobre conjuntos de datos independientes ha resultado ser una herramienta útil para evaluar el sobreajuste de los modelos y la exactitud predictiva de los modelos estadísticos (Martínez-Rincón et al. 2012, Farrell et al. 2014). Tercero, para evaluar posibles sesgos en el modelo final debidos al hecho de que los procesos que regulan los perfiles de temperatura a cada lado de la PBC son diferentes, los perfiles de las bases de datos de 2007–2016 (4 perfiles para cada lado) y de 2017 (3 perfiles para el lado del golfo y 2 perfiles para el lado del Pacífico) fueron extraídos aleatoriamente de la base de datos. Una vez escogidos aleatoriamente los perfiles, el GAMM final fue utilizado para predecir las correspondientes combinaciones de longitud, latitud, TDSM, WSC y ONI para cada uno de los perfiles extraídos. Los resultados fueron explorados visualmente, y el coeficiente de correlación de

Pacific side) databases were randomly extracted from the database. Once the profiles were randomly chosen, the final GAMM was used to predict the corresponding longitude, latitude, SSDT, WSC, and ONI combinations for each of the extracted profiles. Results were explored visually, and the Pearson correlation coefficient was calculated for each of the randomly chosen profiles. Additionally, the differences in the thermocline depth between the model's predictions and the observations were assessed using frequency histograms and by calculating linear correlation and RMSE for all the profiles of the 2017 database. Fourth, the results of the model were compared to the temperature profiles obtained from the hydrodynamic models. For this last part, temperature profile data were extracted from the Copernicus website (<http://marine.copernicus.eu/>), and the Pearson correlation coefficient and the RMSE were calculated to assess the differences between the predictions of the model and the profiles extracted from Copernicus. In order to evaluate the final GAMM's performance with respect to the data obtained from the hydrodynamic models, the differences in thermocline depth between the model's prediction and the Copernicus profiles were also assessed using frequency histograms (observed minus modeled thermocline depth for both the GAMM and the Copernicus data). The modeling process was carried out using the *mgcv* library v.1.8-22 (Wood 2006) of the R environment (R Core Team 2016).

RESULTS

Observed spatial variability

Of the 656 temperature profiles, 545 (~83%) were carried out on the Pacific side and 111 (~17%) on the gulf side. Most of the profiles on the Pacific side took place during the first half of the year and most profiles on the gulf side took place during June–November, although the monthly distribution of the CTD casts was relatively well distributed across the year (Fig. 2).

Figure 3 shows samples of temperature profiles carried out during different years, months, and El Niño conditions on the Pacific and the gulf sides. High temperatures (>25 °C) were more common on the gulf side of the study area than on the Pacific side. Well-defined mixed layers of around 50 m thick were observed on the Pacific side when ONI conditions were low (approximately -0.8, February 2009) and high (~2.3, December 2015). Temperature values of ~20 °C were observed for depths of ~75 m on the Pacific side, except during February 2009 and July 2014, when ONI values were approximately -0.1 to -0.6 and temperature values were noticeably low (Fig. 3b, d). On the gulf side, upper-layer temperatures of >25 °C were observed during August/October 2015 and June 2016, when positive ENSO phases (ONI: ~0.1 to 2) occurred. Surface temperatures of ~30 °C were observed on the gulf side during August and October 2015 (ONI: ~1.4 and 2, respectively). Well-defined mixed layers

Pearson fue calculado para cada uno de los perfiles escogidos aleatoriamente. Adicionalmente, las diferencias en profundidad de la termoclina entre las predicciones del modelo y las observaciones fueron evaluadas utilizando histogramas de frecuencia y calculando la correlación lineal y la RECM para todos los perfiles de la base de datos de 2017. Cuarto, los resultados del modelo fueron comparados con los perfiles de temperatura obtenidos de los modelos hidrodinámicos. Para esta última parte, los datos de perfiles de temperatura fueron extraídos del sitio web Copernicus (<http://marine.copernicus.eu/>); el coeficiente de correlación de Pearson y la RECM fueron calculados para evaluar las diferencias entre las predicciones del modelo y los perfiles extraídos de Copernicus. Para evaluar el desempeño final del GAMM con respecto a los datos obtenidos de los modelos hidrodinámicos, las diferencias en profundidad de la termoclina entre la predicción del modelo y los perfiles Copernicus fueron también evaluadas utilizando histogramas de frecuencia (profundidad de la termoclina observada menos la modelada tanto para el GAMM como para los datos Copernicus). El proceso de modelamiento fue llevado a cabo utilizando la librería *mgcv* v.1.8-22 (Wood 2006) en el entorno R (R Core Team 2016).

RESULTADOS

Variabilidad espacial observada

De los 656 perfiles de temperatura, 545 (~83%) fueron llevados a cabo del lado del Pacífico y 111 (~17%) del lado del golfo. La mayoría de los perfiles del lado del Pacífico se llevaron a cabo durante la primera mitad del año y la mayoría de los perfiles del lado del golfo se llevaron a cabo durante junio–noviembre, aunque la distribución mensual de los lances de CTD estuvo relativamente bien distribuida durante el año (Fig. 2).

La Figura 3 presenta ejemplos de perfiles de temperatura llevados a cabo durante diferentes años, meses y condiciones El Niño en el lado del Pacífico y el lado del golfo. Las temperaturas altas (>25 °C) fueron más comunes del lado del golfo que del lado del Pacífico. Se observaron capas de mezcla bien definidas de alrededor de 50 m de espesor del lado del Pacífico cuando las condiciones ONI estuvieron bajas (aproximadamente -0.8, febrero de 2009) y altas (~2.3, diciembre de 2015). Se observaron temperaturas de ~20 °C a profundidades de ~75 m del lado del Pacífico, excepto en febrero de 2009 y julio de 2014, cuando los valores del ONI estuvieron entre aproximadamente -0.1 y -0.6 y las temperaturas fueron notablemente bajas (Fig. 3b, d). Del lado del golfo, se observaron temperaturas >25 °C en la capa superior en agosto/octubre de 2015 y junio de 2016, cuando ocurrieron fases positivas del ENOS (ONI: ~0.1–2). Se observaron temperaturas superficiales de ~30 °C del lado del golfo en agosto y octubre de 2015 (ONI: ~1.4 y 2, respectivamente). Se observaron capas de mezcla bien definidas de ~50 m de espesor

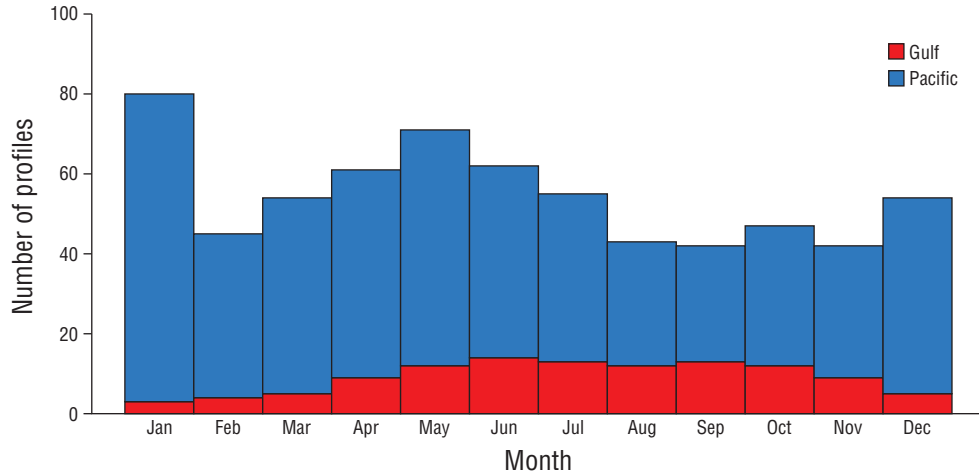


Figure 2. Monthly distribution of the CTD casts used to fit the final generalized additive mixed model, for the Pacific (blue bars) and gulf (red bars) sides.

Figura 2. Distribución mensual de los lanzes de CTD utilizados para ajustar el modelo mixto aditivo generalizado final, para el lado del Pacífico (barras azules) y el del golfo (barras rojas).

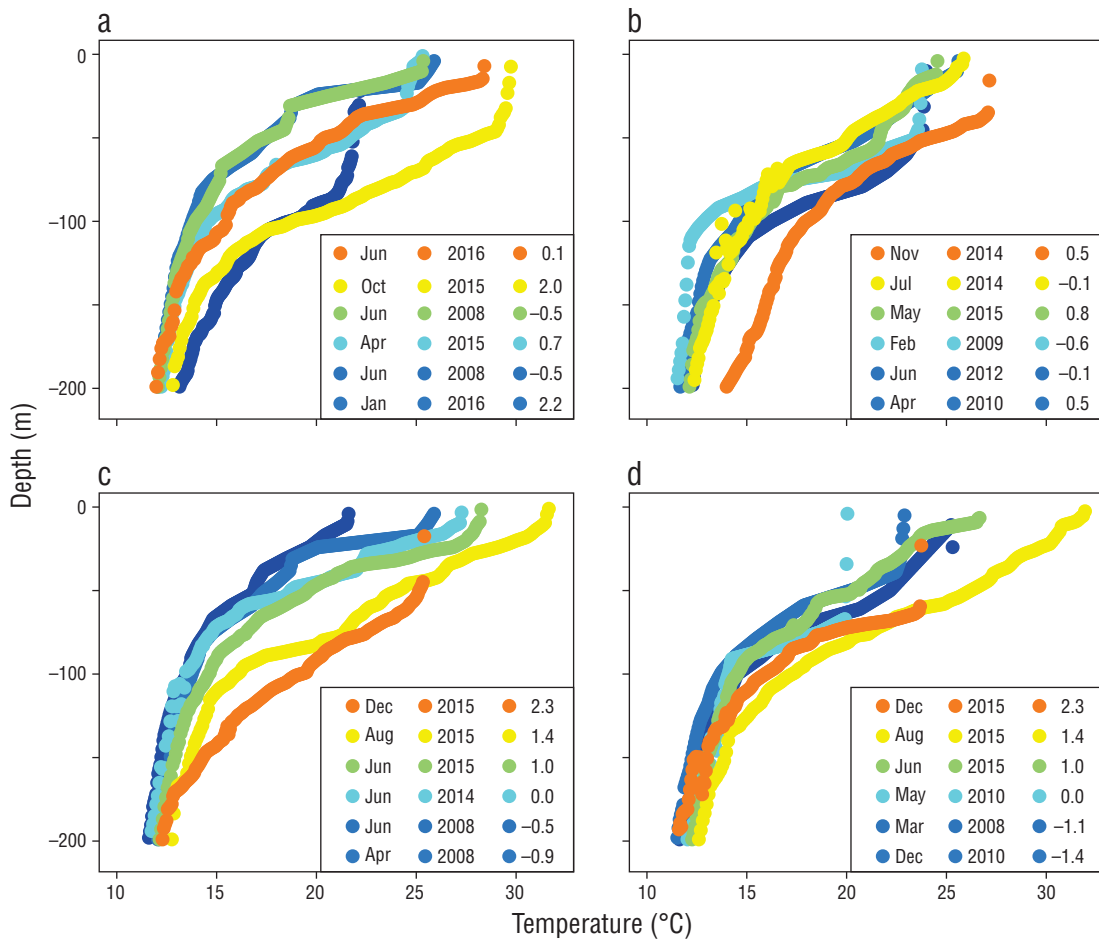


Figure 3. Examples of the observed temperature profiles for the gulf (a, c) and Pacific (b, d) sides of the study area. The corresponding year, month, and Oceanic Niño Index conditions for each profile are shown in the lower right corner of each panel.

Figura 3. Ejemplos de los perfiles de temperatura observados para el lado del golfo (a, c) y el lado del Pacífico (b, d) del área de estudio. El año, el mes y las condiciones del Índice Oceánico de El Niño correspondientes a cada perfil se muestran en la esquina inferior a la derecha de cada panel.

with a thickness of ~50 m were observed during positive ONI conditions (ONI: >2) in 2015 and 2016 (Fig. 3a, c). The deepest mixed layer on the gulf side (>100 m) was observed during January 2016, when ONI values were highest (~2.2) across the whole study period (Fig. 3a).

Statistical modeling

The final GAMM explained 86.2% of the total deviance. The validation process of the fitted GAMM was satisfactory: histogram of Pearson residuals appeared to be normal and centered approximately at zero, and no signs of residual heterogeneity were apparent for any of the covariates of the model (Fig. 4), except for the spatial distribution of the residuals. Although some clustering of the residuals was observed, no apparent spatial pattern was observed (Fig. 4f). Concurrency was low (<0.3) for all single covariates, which suggests low multicollinearity amongst predictors. All variables resulted in a decrease of at least 2 AIC units, and depth was the variable that had the higher explained deviance (69.1%). From the environmental variables, SSDT was the one that accounted for the higher explained deviance (14.3%) and highest decrease in AIC (75,067.07; Table 1).

The partial effects plots of the GAMM suggested that mean temperatures at the surface were higher on the gulf side (~29 °C) than on the Pacific side (~25 °C). The dT/dZ gradient appeared to be more abrupt for the mean profile of the gulf side, because differences of around 4 °C between the profiles for the gulf and Pacific sides were observed at the surface, and differences <1 °C were observed at around 50 m; additionally, temperature appeared to be higher on the gulf side throughout the whole water column (Fig. 5a). In general, higher temperatures were observed at higher SSDT values in both regions; higher mean temperatures (~22 °C) were observed on the gulf side when SSTD values >0.5 m occurred. On the other hand, a peak of high mean temperature (~23 °C) on the Pacific side agreed with SSTD values of ~0.48 m (Fig. 5b). The effect of WSC on mean temperature was mild for WSC values ranging from -1.5×10^{-7} to 1×10^{-7} Pa, when only slight variations around the temperature value of 18 °C were observed. Low mean temperatures on the gulf (~16 °C) side were associated with relatively high WSC values (2×10^{-7} Pa), and high temperatures (~29 °C) were associated with WSC values $> 2 \times 10^{-7}$ Pa. For the Pacific side, low temperatures (~15 °C) were also associated with relatively high WSC values (2×10^{-7} Pa). No WSC values $> 2.5 \times 10^{-7}$ Pa were observed on the gulf side, which caused the effects plots to produce unrealistic values (Fig. 5c). As expected, high ONI values (~1.9 °C) were associated with high mean temperatures (~18.8 °C) (Fig. 5d). Spatially, higher mean temperatures were observed on the western and northwestern parts of the study area (inside the gulf), and lower temperatures were observed in the north-eastern zone of the Pacific region (Fig. 5e). The parametric effect of the nested variable "Region" showed that mean

durante condiciones ONI positivas (ONI: >2) en 2015 y 2016 (Fig. 3a, c). La capa de mezcla más profunda del lado del golfo (>100 m) fue observada en enero de 2016, cuando los valores ONI (~2.2) fueron los más altos de todo el estudio (Fig. 3a).

Modelamiento estadístico

El GAMM final explicó el 86.2% de la desviación total. El proceso de validación del GAMM ajustado fue satisfactorio: el histograma de los residuales de Pearson pareció ser normal y estar centrado aproximadamente en cero; no hubo señal aparente de heterogeneidad residual para cualquiera de las covariables del modelo (Fig. 4), con la excepción de la distribución espacial de los residuales. Aunque se observó algún agrupamiento de los residuales, no se observó un patrón espacial aparente (Fig. 4f). La concurridad fue baja (<0.3) para todas las covariables solas, lo cual sugiere baja multicolinealidad entre los predictores. Todas las variables resultaron en una disminución de por lo menos 2 unidades del CIA, y la profundidad fue la variable que tuvo mayor desviación explicada (69.1%). De las variables ambientales, la TDSM capturó la mayor porción de desviación explicada (14.3%) y la mayor disminución en el CIA (75,067.07; Tabla 1).

Los gráficos de efectos parciales del GAMM sugirieron que las temperaturas promedio en la superficie fueron más altas del lado del golfo (~29 °C) que del lado del Pacífico (~25 °C). El gradiente dT/dZ del perfil promedio del lado del golfo pareció ser más abrupto, ya que se observaron diferencias de cerca de 4 °C en la superficie entre los perfiles del golfo y los del Pacífico, y se observaron diferencias <1 °C alrededor de los 50 m de profundidad; adicionalmente, la temperatura pareció ser más alta del lado del golfo en toda la columna de agua (Fig. 5a). En general, se observaron temperaturas más altas a valores de TDSM más altos en las 2 regiones; se observaron mayores temperaturas promedio (~22 °C) del lado del golfo cuando los valores de TDSM fueron >0.5 m. Por otra parte, un pico de alta temperatura promedio (~23 °C) del lado del Pacífico coincidió con valores de TDSM de ~0.48 m (Fig. 5b). El efecto del WSC sobre la temperatura promedio fue leve para valores de WSC entre -1.5×10^{-7} y 1×10^{-7} Pa, cuando solo se observaron variaciones leves alrededor del valor de temperatura de 18 °C. Las temperaturas promedio bajas del lado del golfo (~16 °C) estuvieron asociadas con valores del WSC relativamente altos (2×10^{-7} Pa), y las temperaturas altas (~29 °C) estuvieron asociadas con valores de WSC $> 2 \times 10^{-7}$ Pa. Del lado del Pacífico, las temperaturas bajas (~15 °C) también estuvieron asociadas con valores de WSC relativamente altos (2×10^{-7} Pa). No se observaron valores de WSC $> 2.5 \times 10^{-7}$ Pa del lado del golfo, lo cual llevó a que los gráficos de efectos parciales produjeran valores no creíbles (Fig. 5c). Como se esperaba, los valores altos del ONI (~1.9 °C) estuvieron relacionados con

temperatures were statistically higher on the gulf side when compared to the temperatures measured on the Pacific side (Fig. 5f).

The model fitted to the 2007–2016 database was statistically satisfactory (correlation between observed and predicted temperature was ~ 0.93 , $P < 0.05$, and the RMSE was ~ 1.55 °C). However, important differences between *in-situ* and predicted thermocline depths were observed. For the gulf side of the study area, mean difference in thermocline depth was ~ 25.55 m (95% CI: ± 7.01 m; SD = 37.37 m) and for the Pacific side mean difference was 37.92 m (95% CI: ± 3.25 m; SD = 38.62 m), suggesting that the final GAMM underestimates thermocline depth (Fig. 6). Correlation between observed and modeled thermocline depths was low (0.21) and significant ($P < 0.05$). For the gulf side of the study area, higher deviations (~ 50 m) were observed during June 2014 and July 2015, and deviations of ~ 0 m were present during April through July 2008. For the Pacific side, higher

temperaturas promedio altas (~ 18.8 °C) (Fig. 5d). Especialmente, se observaron temperaturas promedio más altas del lado occidental y el lado noroccidental del área de estudio (dentro del golfo) y se observaron temperaturas más bajas en la zona nororiental de la región del Pacífico (Fig. 5e). El efecto paramétrico de la variable anidada “Región” mostró que las temperaturas promedio fueron estadísticamente más altas del lado del golfo comparadas con las temperaturas medidas del lado del Pacífico (Fig. 5f).

El modelo ajustado a la base de datos de 2007–2016 fue estadísticamente satisfactorio (la correlación entre la temperatura observada y la predicha fue ~ 0.93 , $P < 0.05$, y la RECM fue ~ 1.55 °C). Sin embargo, se observaron importantes diferencias entre la profundidad de la termoclina *in situ* y la predicha. Para el lado del golfo del área de estudio, la diferencia promedio en la profundidad de la termoclina fue de ~ 25.55 m (IC 95%: ± 7.01 m; DE = 37.37 m) y para el lado del Pacífico la diferencia promedio fue de 37.92 m

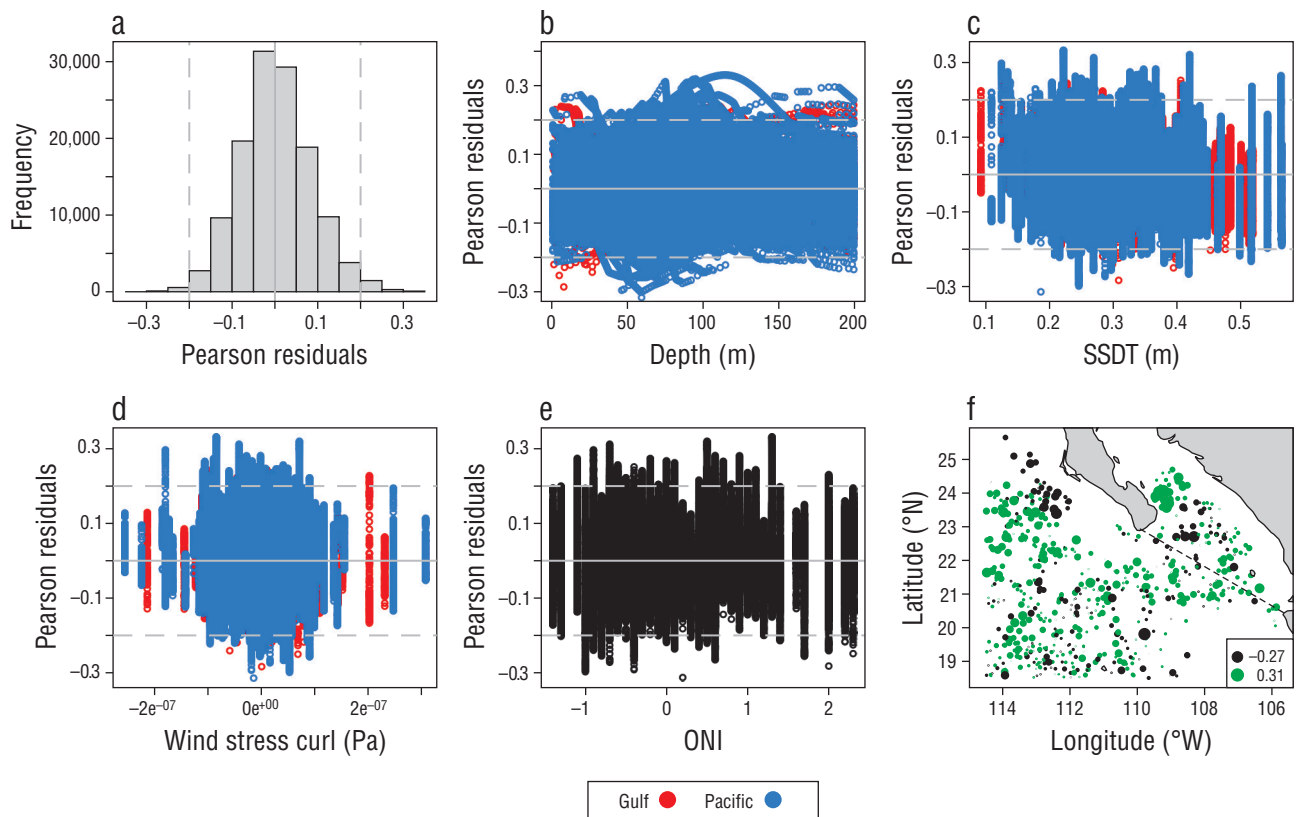


Figure 4. Diagnostic plots of the Pearson residuals of the final generalized additive mixed model: histogram of the fitted generalized additive mixed model (a) and residuals vs. depth (b), sea surface dynamic topography (SSDT) (c), wind stress curl (d), Oceanic Niño Index (ONI) (e), and longitude/latitude (f). Continuous gray line is the theoretical mean (zero), and broken gray lines depict the -0.2 , 0.2 quantile interval. Broken black line in f marks the division between the Pacific side and the gulf side.

Figura 4. Gráficos de diagnóstico de los residuales de Pearson del modelo mixto aditivo generalizado final: histograma del modelo mixto aditivo generalizado ajustado (a) y residuales vs. profundidad (b), topografía dinámica de la superficie del mar (SSDT) (c), rotacional del esfuerzo del viento (d), Índice Oceánico de El Niño (e) y longitud/latitud (f). La línea gris continua es el promedio teórico (cero) y las líneas grises discontinuas muestran el intervalo de cuantiles -0.2 , 0.2 . La línea negra discontinua en f señala la división entre el lado del Pacífico y el lado del golfo.

Table 1. Summary of the final generalized additive mixed model fitted to temperature profiles obtained from CTD casts from June 2007 through November 2016 in the Pacific Ocean off Mexico. The final explained deviance is depicted in bold.

Tabla 1. Resumen del modelo mixto aditivo generalizado ajustado a los perfiles de temperatura obtenidos de lances de CTD de junio de 2007 a noviembre de 2016 en el océano Pacífico frente a México. La desviación explicada final se muestra en negrilla.

Variable	Region	EDF	Explained deviance (%)	Cumulative deviance (%)	AIC	ΔAIC
Temp ~ α + s(Depth)	Depth(by=G)	8.54	69.10	69.10	-189,361.8	-
	Depth(by=P)	8.58				
Temp ~ α + s(Depth) + s(SSDT)	SSDT(by=G)	8.08	14.92	83.40	-264,428.9	75,067.07
	SSDT(by=P)	8.93				
Temp ~ α + s(Depth) + s(SSDT) + s(WSC)	WSC(by=G)	8.89	0.40	83.80	-266,547.6	2,118.71
	WSC(by=P)	8.90				
Temp ~ α + s(Depth) + s(SSDT) + s(WSC) + s(ONI)	-	8.91	0.30	84.91	-267,756.5	1,208.92
Temp ~ α + s(Depth) + s(SSDT) + s(WSC) + s(ONI) + s(Lon,Lat)	-	28.85	2.00	86.10	-285,869.1	18,112.50
Temp ~ α + s(depth) + s(SSDT) + s(WSC) + s(ONI) + s(Lon,Lat) + Region	-	-	0.10	86.20	-286,285.5	416.30

EDF, effective degrees of freedom; AIC, Akaike information criterion; Temp, temperature; SSDT, sea surface dynamic topography; WSC, wind stress curl; ONI, Oceanic Niño Index; Lon, longitude; Lat, latitude; G, gulf; P, Pacific.

deviations (>100 m) were observed during July through September 2011 and October/December 2015, and lower deviations (<20 m) were mainly observed during the second half of 2007 and during April through December 2012 (Fig. 7).

Although the model's predictive performance based on an independent dataset (database of profiles for 2017) was

(IC 95%: ±3.25 m; DE = 38.62 m), lo cual sugiere que el GAMM final subestimó la profundidad de la termoclina (Fig. 6). La correlación entre la profundidad de la termoclina observada y la modelada fue baja (0.21) y significativa ($P < 0.05$). Para el lado del golfo del área de estudio, se observaron desviaciones más altas (~50 m) en junio de 2014 y

also statistically satisfactory (predicted and observed temperatures were highly correlated [$\rho \sim 0.93$, $P < 0.05$] and the RMSE was ~ 1.48 °C), some important deviations in observed *vs.* modeled thermocline depths were observed. For the gulf side, the mode for the difference in observed *vs.* modeled thermocline depths was around -10 m, and for the Pacific side it was around 22 m. Mean deviations for thermocline depth were 3.28 m (95% CI: ± 9.800 m; SD = 22.68) for the gulf side and 18.40 m (95% CI: ± 6.185 m; SD = 19.86 m) for Pacific side (Fig. 8). The correlation coefficient for the *in-situ vs.* modeled thermocline depths from the 2017 validation data was ~ 0.44 , and it was statistically significant ($P < 0.05$).

In general, deviations between observed and modeled thermocline depths appeared to be larger for the Pacific side of the study area than for the gulf side. The larger deviations were associated with higher SSDT (>0.25 m) and positive ONI values, for both the training (2006–2016) and the validation (2017) datasets. A spatial effect was also apparent, because higher deviations were observed at around 22 °N and west of 112.5 °W for the training dataset and at around 22 °N for the validation dataset. No apparent pattern was observed for WSC (Figs. S1, S2).

The observed and predicted temperature profiles that were randomly extracted from the Pacific and gulf datasets are presented in Figures 9 and 10. Deviations between observed and modeled temperatures of up to 2 °C were observed in some of the profiles that were carried out during 2007–2016. The model apparently failed to reproduce the observed profiles when the mixed layer was more evident, although it reproduced the profiles for the gulf side reasonably well; for example, a deviation in observed *vs.* modeled thermocline depth of approximately -13 m was observed in a May 2016 profile (Fig. 9c, Table 2). That profile was carried out during mild SSDT conditions (~ 0.22 m), relatively high downward water transport (-1.08×10^{-8} Pa), and positive ONI conditions (0.6). Larger deviations were also observed in profiles for the gulf side (~ 42.21 m), although the model appeared to reproduce the observations well (Fig. 9d); mean environmental conditions when this CTD cast was carried out were mild downwelling (-1.96×10^{-8} Pa), mild SSDT (0.27 m), and neutral ONI (~ 0.0).

The model was apparently less accurate when predicting profiles carried out on the Pacific side, because the deviations between observed and modeled thermocline depths were >20 m for 3 out of the 4 sample profiles drawn from the Pacific side. The largest deviations (~ 36.39 m) were observed for May 2015, when intense downwelling (-11.60×10^{-8} Pa), mild SSDT (0.23 m), and positive ONI (-0.8) conditions occurred (Fig. 9g, Table 2). The model reproduced a profile for May 2008 reasonably well, although deviations between observed and modeled temperatures were >11 m (Fig. 9e, Table 2); environmental conditions at that time were mild SSDT (0.19 m), high-intensity downwelling (-17.30×10^{-8} Pa), and positive ONI (1.1) (Table 2).

julio de 2015, y se observaron desviaciones de ~ 0 m en abril–julio de 2008. Para el lado del Pacífico, se observaron desviaciones más altas (>100 m) de junio a septiembre de 2011 y en octubre y diciembre de 2015, y se observaron desviaciones más bajas (<20 m) principalmente en la segunda mitad de 2007 y entre abril y diciembre de 2012 (Fig. 7).

Aunque el desempeño predictivo del modelo basado en un conjunto de datos independiente (base de datos de perfiles de 2017) también fue estadísticamente satisfactorio (las temperaturas predichas y observadas estuvieron altamente correlacionadas [$\rho \sim 0.93$, $P < 0.05$] y la RECM fue ~ 1.48 °C), también se observaron algunas desviaciones importantes en la profundidad de la termoclina observada *vs.* la modelada. Para el lado del golfo, la moda de la diferencia en la profundidad de la termoclina observada *vs.* la modelada fue de aproximadamente -10 m y para el lado del Pacífico fue de aproximadamente 22 m. Las desviaciones promedio de la profundidad de la termoclina fueron 3.28 m (IC 95%: ± 9.800 m; DE = 22.68) para el lado del golfo y 18.40 m (IC 95%: ± 6.185 m; DE = 19.86 m) para el lado del Pacífico (Fig. 8). El coeficiente de correlación de la profundidad de la termoclina *in situ vs.* la modelada para los datos de validación de 2017 fue ~ 0.44 , y fue estadísticamente significativo ($P < 0.05$).

En general, las desviaciones entre la profundidad de la termoclina observada *vs.* la modelada parecieron ser más altas para el lado del Pacífico del área de estudio que para el lado del golfo. Las desviaciones más grandes estuvieron asociadas con TDSM más altas (>0.25 m) y con valores de ONI positivos, tanto para los datos de entrenamiento (2006–2016) como para los de validación (2017). También fue aparente un efecto espacial, ya que se observaron desviaciones más altas alrededor de 22 °N y al oeste de 112.5 °W para el conjunto de datos de entrenamiento y alrededor de 22 °N para el conjunto de datos de validación. No se observó un patrón aparente para el WSC (Figs. S1, S2).

Los perfiles de temperatura observados y predichos extraídos aleatoriamente de los conjuntos de datos para el Pacífico y el golfo son presentados en las Figuras 9 y 10. Se observaron desviaciones entre temperaturas observadas y modeladas de hasta 2 °C en algunos de los perfiles llevados a cabo para 2007–2016. Aparentemente, el modelo no logró reproducir los perfiles observados cuando la capa de mezcla era más evidente, aunque reprodujo razonablemente bien los perfiles para el lado del golfo; por ejemplo, se observó una desviación en la profundidad de la termoclina observada *vs.* modelada de aproximadamente -13 m en un perfil de mayo 2016 (Fig. 9c, Tabla 2). Este perfil se llevó a cabo durante condiciones TDSM leves (~ 0.22 m), un transporte de agua hacia abajo relativamente alto (-1.08×10^{-8} Pa) y condiciones ONI positivas (0.6). También se observaron desviaciones más grandes para los perfiles del lado del golfo (~ 42.21 m), aunque el modelo pareció reproducir bien las observaciones (Fig. 9d); las condiciones ambientales promedio cuando se llevó a cabo este lance de CTD fueron de hundimiento leve (-1.96×10^{-8} Pa), TDSM leve (0.27 m) y ONI neutro (~ 0.0).

Even with the deviations mentioned above, the correlation coefficient between the observed and the modeled data was high (>0.94) for all the profiles that were randomly extracted from the training database. The model-predicted profiles for the independent dataset (2017) are presented in Figure 10, and the environmental conditions associated with the profiles are shown in Table 3. For April 2017 the model reproduced a profile from the gulf side reasonably well, which coincided with mild SSDT values and negative WSC, resulting in a deviation of ~ 0 m for observed vs. predicted thermocline depths (Fig. 10c, Table 3). Another profile where the model and the observations were in agreement was observed for

El modelo fue, aparentemente, menos exacto al predecir perfiles del lado del Pacífico, ya que las desviaciones entre las profundidades de la termoclina observadas y modeladas fueron >20 m para 3 de los 4 ejemplos de perfiles tomados del lado del Pacífico. Las desviaciones más grandes (~ 36.39 m) fueron observadas en mayo de 2015, cuando ocurrió un hundimiento de agua intenso (-11.60×10^{-8} Pa), TDSM leve (0.23 m) y condiciones ONI positivas (-0.8) (Fig. 9g, Tabla 2). El modelo reprodujo razonablemente bien un perfil llevado a cabo en mayo de 2008, aunque las desviaciones entre la temperatura observada y la modelada fueron >11 m (Fig. 9e, Tabla 2); las condiciones ambientales presentes

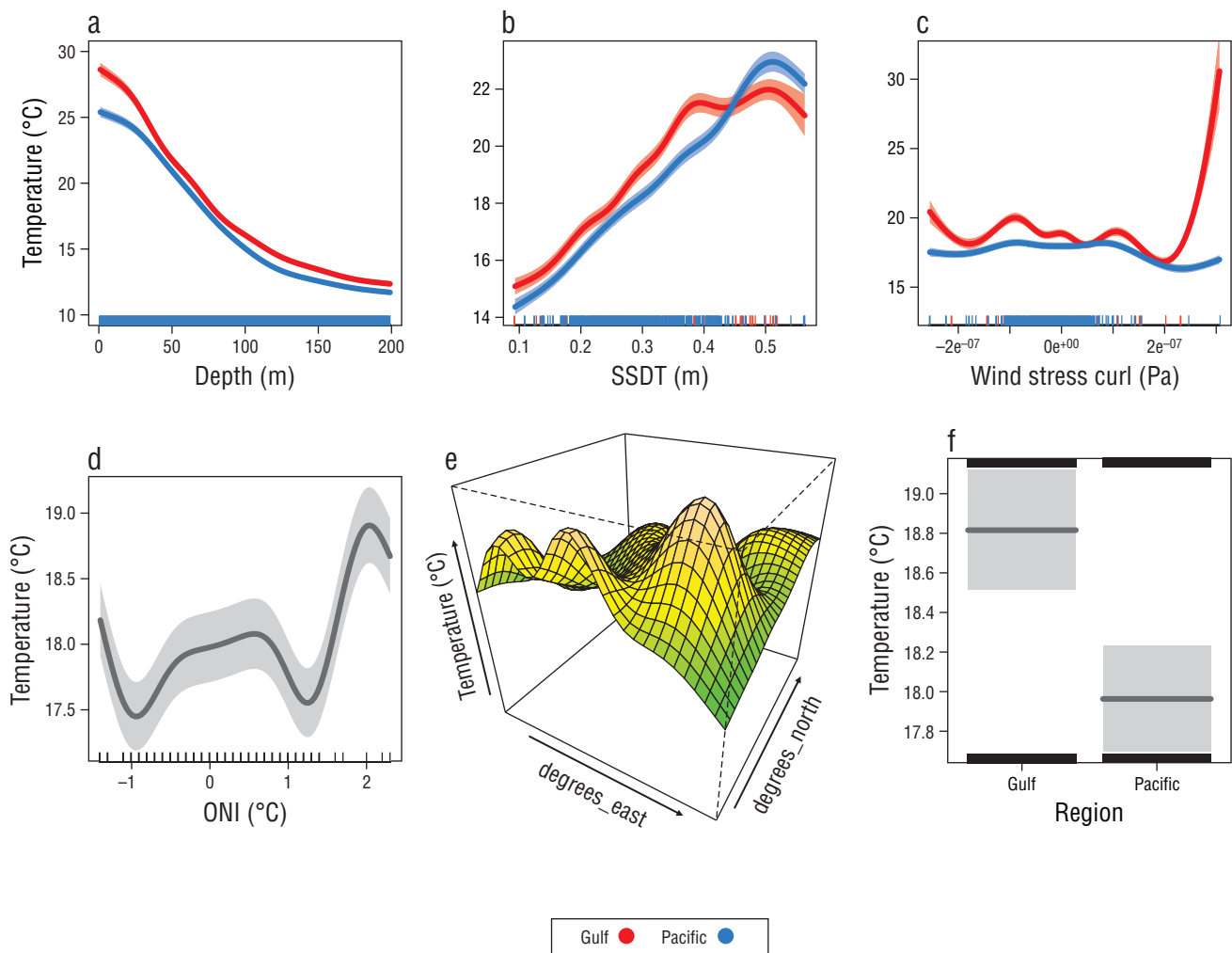


Figure 5. Partial effects plots of the predictor variables used in the final generalized additive mixed model: depth (a), sea surface dynamic topography (SSDT) (b), wind stress curl (c), Oceanic Niño Index (ONI) (d), latitude/longitude interaction (e), and mean parametric temperature for the Pacific and gulf sides of the study area (f). Shades in a–c depict the 95% Bayesian credibility interval, and lines perpendicular to the x-axis (rug plot) depict the density of the observations for each variable.

Figura 5. Gráficos de efectos parciales de las variables predictivas utilizadas en el modelo mixto aditivo generalizado final: profundidad (a), topografía dinámica de la superficie del mar (SSDT) (b), rotacional del esfuerzo del viento (c), Índice Oceánico de El Niño (ONI) (d), interacción latitud/longitud (e) y temperatura paramétrica promedio para el lado del Pacífico y el lado del golfo del área de estudio. La línea azul claro en a–c muestra el intervalo de credibilidad bayesiano del 95% y las líneas perpendiculares al eje x (“rug plot”) muestran la densidad de las observaciones para cada variable.

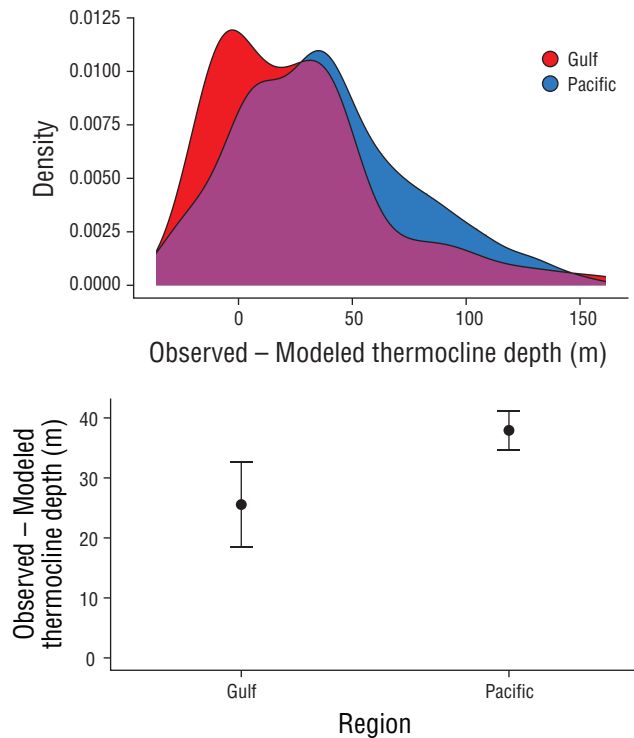


Figure 6. Deviations in the observed minus the modeled thermocline depths for the 2007–2016 data, which were used to fit the generalized additive mixed model. Kernel density curves (top) and mean deviations with 95% confidence intervals (bottom) for the Pacific and gulf sides of the study area.

Figura 6. Desviaciones en la profundidad de la termoclina observada menos la modelada para los datos de 2007–2016, que fueron utilizados para ajustar el modelo mixto aditivo generalizado. Curvas de densidad Kernel (arriba) y desviaciones promedio con intervalos de confianza del 95% (abajo) para el lado del Pacífico y el lado del golfo del área de estudio.

February 2017, also from the gulf side, which coincided with relatively high upwelling (1.94×10^{-8} Pa) and negative ONI conditions (-0.1). For this profile, the deviation between observed vs. predicted thermocline depth was around 3.5 m (Fig. 10d, Table 3). On the other hand, higher deviations in thermocline depth (~ 18 m) were observed for a profile that was carried out on the Pacific side of the study area, where deviations of ~ 5 °C were observed for surface waters (Fig. 10b, Table 3); this profile was observed in downwelling conditions (-0.711×10^{-8} Pa) and high SSDT (0.32 m). The other profile that was randomly extracted from the Pacific side showed a deviation in thermocline depth of around 4 m, although deviations of ~ 4 °C were observed in the first 50 m of the water column (Fig. 10f). The environmental conditions associated with this profile were mild downwelling (-2.11×10^{-8} Pa), high SSDT (0.28 m), and positive ONI (0.4) (Fig. 10f, Table 3).

A high correlation coefficient (mean = 0.98; 95% CI: 0.978–0.981) and high RMSE (mean = 1.61 °C; 95% CI;

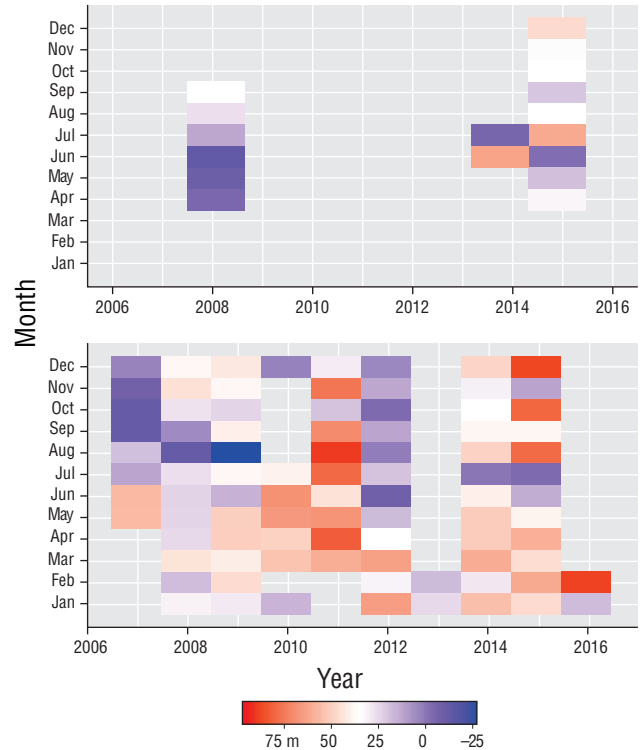


Figure 7. Hovmöller diagram of the mean monthly deviations of the observed minus the modeled thermocline depths for the gulf (top) and Pacific (bottom) sides of the study area. Color scale is in meters.

Figura 7. Gráfico Hovmöller de las desviaciones mensuales promedio en la profundidad de la termoclina observada menos la modelada para el lado del golfo (arriba) y el lado del Pacífico (abajo) del área de estudio. La escala a color está en metros.

cuando se hizo esta observación incluyeron TDSM leve (0.19 m), hundimiento de agua intenso (-17.30×10^{-8} Pa) y ONI positivo (1.1) (Tabla 2). Aún con las desviaciones mencionadas, el coeficiente de correlación entre los datos observados y los modelados fue alto (>0.94) para todos los perfiles que fueron extraídos aleatoriamente de la base de datos de entrenamiento. Los perfiles predichos por el modelo para el conjunto de datos independiente (2017) se presentan en la Figura 10, y las condiciones ambientales asociadas con los perfiles se presentan en la Tabla 3. El modelo reprodujo razonablemente bien un perfil del lado del golfo para abril de 2017, que coincidió con valores leves del TDSM y un WSC negativo, lo que resultó en una desviación entre profundidad de la termoclina observada vs. predicha de ~ 0 m (Fig. 10c, Tabla 3). Otro perfil en el que el modelo y las observaciones estuvieron en acuerdo se observó para febrero de 2017, también del lado del golfo, el cual coincidió con una surgencia relativamente fuerte (1.94×10^{-8} Pa) y un ONI negativo (-0.1). Para este perfil, una desviación entre la profundidad de la termoclina observada vs. la predicha fue de aproximadamente 3.5 m (Fig. 10d, Tabla 3). Por otra parte, se observaron desviaciones más altas de la profundidad de

1.54–1.68 °C) were also observed when comparing the predictions of the final GAMM with the profiles extracted from Copernicus (Fig. S3). The differences in thermocline depth in the *in-situ* vs. the Copernicus profiles (mean difference = 20.68 m; 95% CI: 17.78–23.58 m) and the *in-situ* profiles vs. the profiles predicted by the final GAMM (mean difference = 35.83 m; 95% CI = 32.87–38.80 m) were also important. Results from this analysis suggest that the data extracted from both the hydrodynamic models (Copernicus) and the GAMM underestimate the thermocline depth with deviations >100 m in some of the profiles (Fig. S4).

DISCUSSION

To the best of the author’s knowledge, this paper represents the first attempt to model temperature profiles using GAMMs. Figure 5 shows that the relationship between temperature and all the covariates was nonlinear (EDF > 1), so

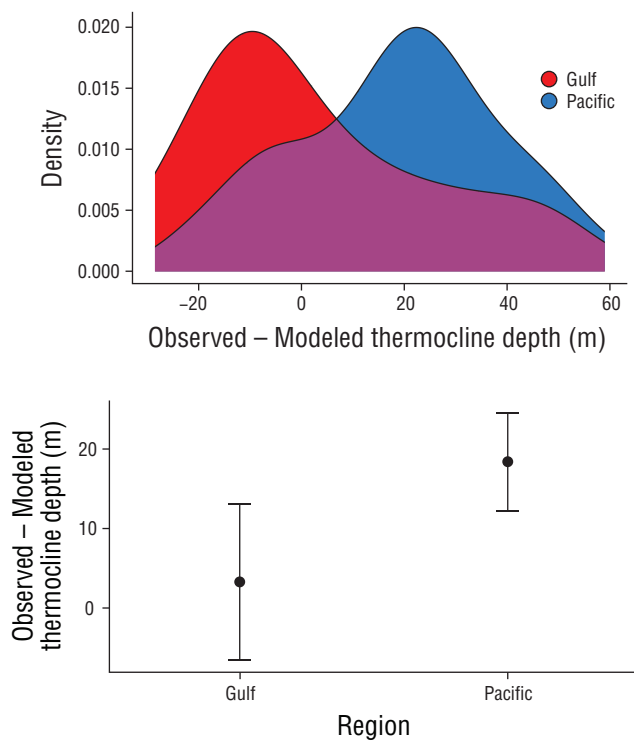


Figure 8. Deviations in observed minus the modeled thermocline depths for the 2017 data, which were used to validate the generalized additive mixed model. Kernel density curves (top) and mean deviations with 95% confidence intervals (bottom) for the Pacific and gulf sides of the study area.

Figura 8. Desviaciones en la profundidad de la termoclina observada menos la modelada para los datos de 2017, que fueron utilizados para validar el modelo mixto aditivo generalizado. Curvas de densidad Kernel (arriba) y desviaciones promedio con intervalos de confianza del 95% (abajo) para el lado del Pacífico y el lado del golfo del área de estudio.

la termoclina (~18 m) para un perfil llevado a cabo del lado del Pacífico del área de estudio, con desviaciones de ~5 °C observadas en aguas superficiales (Fig. 10b, Tabla 3); este perfil fue observado durante condiciones de hundimiento de agua (-0.711×10^{-8} Pa) y TDSM alta (0.32). El otro perfil que fue extraído aleatoriamente del lado del Pacífico presentó una desviación en la profundidad de la termoclina alrededor de los 4 m, aunque se observaron desviaciones de ~4 °C en los primeros 50 m de la columna de agua (Fig. 10f). Las condiciones ambientales asociadas con este perfil fueron hundimiento leve (-2.11×10^{-8} Pa), TDSM alta (0.28 m) y ONI positivo (0.4) (Fig. 10f, Tabla 3).

Se observaron también un coeficiente de correlación alto (promedio = 0.98; IC 95%: 0.978–0.981) y un valor de RECM alto (promedio = 1.61 °C; IC 95%: 1.54–1.68 °C) cuando se compararon las predicciones del GAMM final y los perfiles extraídos de Copernicus (Fig. S3). También fueron importantes las diferencias en la profundidad de la termoclina de los perfiles *in situ* vs. los perfiles Copernicus (diferencia promedio = 20.68 m; IC 95%: 17.78–23.58 m) y los perfiles *in situ* vs. los perfiles predichos por el GAMM final (diferencia promedio = 35.83 m; IC 95%: 32.87–38.80 m). Los resultados de este análisis sugieren que tanto los datos extraídos de los modelos hidrodinámicos (Copernicus) como aquellos extraídos del GAMM subestiman la profundidad de la termoclina con desviaciones >100 m en algunos de los perfiles (Fig. S4).

DISCUSIÓN

A conocimiento del autor, este manuscrito representa el primer intento para modelar perfiles de temperatura utilizando un GAMM. La Figura 5 muestra que la relación entre la temperatura y todas las covariables fue no lineal (GLE > 1), así que elegir el modelo aditivo más complejo sobre su contraparte lineal pareció ser un buen enfoque. El GAMM final sugirió que la capa de mezcla de ~35 a 40 m fue evidente tanto del lado del golfo como del lado del Pacífico del área de estudio a lo largo del periodo de estudio; también indicó que los cambios de temperatura vs. profundidad fueron más abruptos del lado del golfo, ya que se observaron diferencias de alrededor de 4 °C en la superficie y las curvas estaban cerca a converger alrededor de los 40 m (diferencia <1 °C), lo cual sugiere que la columna de agua del lado del golfo presentó una estratificación vertical más fuerte. Una capa de mezcla somera (<60 m) bien definida es una característica típica del océano Pacífico oriental tropical, donde una termoclina permanente domina la estructura térmica (Fiedler y Talley 2006). Se observaron temperaturas promedio más altas del lado del golfo. El GC es un mar semicerrado y es considerado una cuenca de evaporación; aquí, las altas tasas de evaporación resultan en la formación de masas de agua con temperaturas cálidas y altas salinidades (Castro et al. 2006). Por otra parte, el lado del Pacífico del área de estudio

choosing the more-complex additive model over its linear counterpart seemed to be a good approach. The final GAMM suggested that a mixed layer of ~35 to 40 m was evident on both the gulf and the Pacific sides of the study area throughout the study period; it also indicated that temperature vs. depth changes were more abrupt on the gulf side, because differences of around 4 °C were observed at the surface and the curves nearly converged at around 40 m (<1 °C difference), suggesting that the water column on the gulf side had stronger vertical stratification. A shallow (<60 m), well-defined mixed layer is a typical feature of the eastern tropical Pacific Ocean, where a permanent thermocline dominates the thermal structure (Fiedler and Talley 2006). Higher mean temperatures were observed on the gulf side of the study area. The GC is a semi-enclosed sea, and it is considered an evaporation basin; here, the high evaporation rates result in the formation of water masses with warm temperatures and high salinities (Castro et al. 2006). On the other hand, the Pacific side of the study area is mainly influenced by the cold, nutrient-rich California Current. Additionally,

está principalmente influenciado por las aguas frías y ricas en nutrientes de la corriente de California. Adicionalmente, ocurren fuertes eventos de surgencia durante mayo–junio en esta zona (Zaytsev et al. 2003), y estos eventos son capaces de romper la estratificación de la columna de agua. Esto explicaría el hecho de que una estratificación más fuerte de la columna de agua con temperaturas altas fue observada en el gráfico de efectos del GAMM final. En el área de estudio, la profundidad de la termoclina es afectada por el flujo neto de calor y el transporte vertical de agua debido a la mezcla por el viento. El modelo también sugirió que las temperaturas más altas ocurrieron durante eventos El Niño (valores ONI positivos) y cuando se observaron valores altos de TDSM y valores negativos de WSC. Los efectos típicos de las condiciones fuertes de El Niño incluyen temperaturas altas de la capa superior del océano y un aumento en la profundidad de la termoclina (Collins et al. 2010). Valores más altos de la TDSM están relacionados con ciertas características oceanográficas que causan hundimiento de aguas superficiales y una profundización de la termoclina, como por ejemplo los

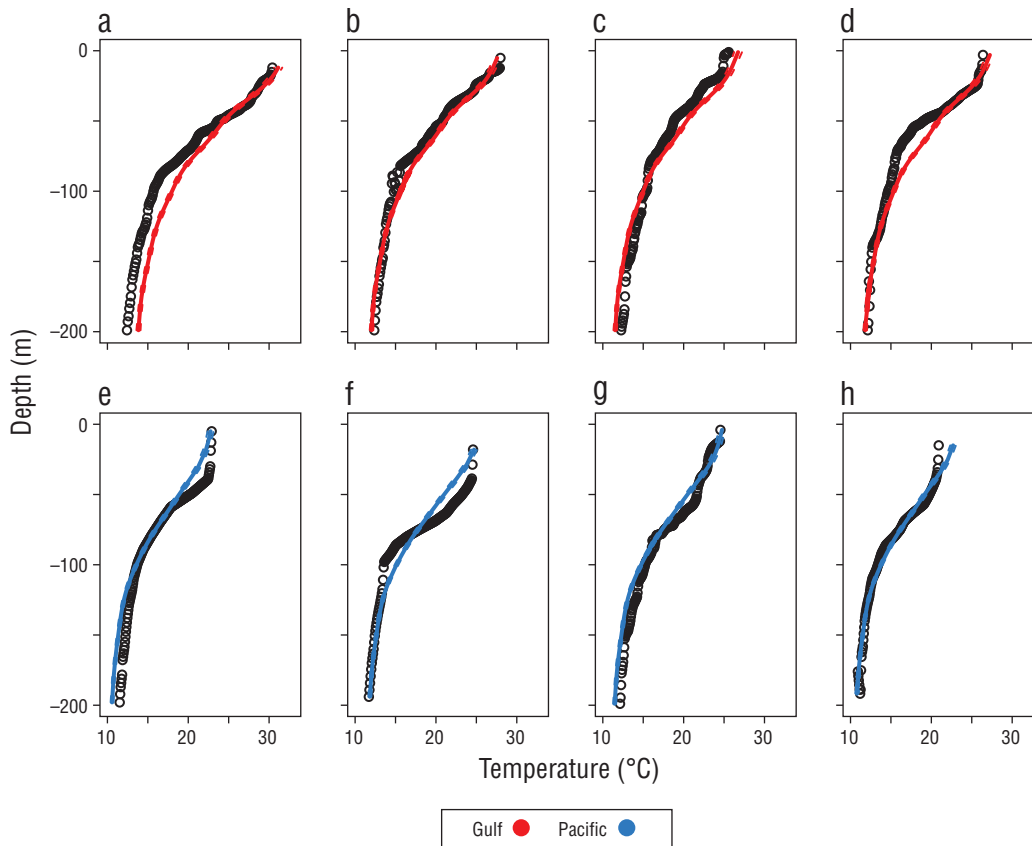


Figure 9. Observed (circles) and model-predicted (continuous line) temperature profiles that were randomly chosen for the gulf (red) (a–d) and Pacific (blue) (e–h) sides of the study area. Geographic location of each CTD cast is depicted in matching letters in Figure 1.

Figura 9. Perfiles de temperatura observados (círculos) y predichos por el modelo (línea continua) escogidos aleatoriamente para el lado del golfo (a–d) y el lado del Pacífico (e–h) del área de estudio. La ubicación geográfica de cada lance de CTD se muestra con letras correspondientes en la Figura 1.

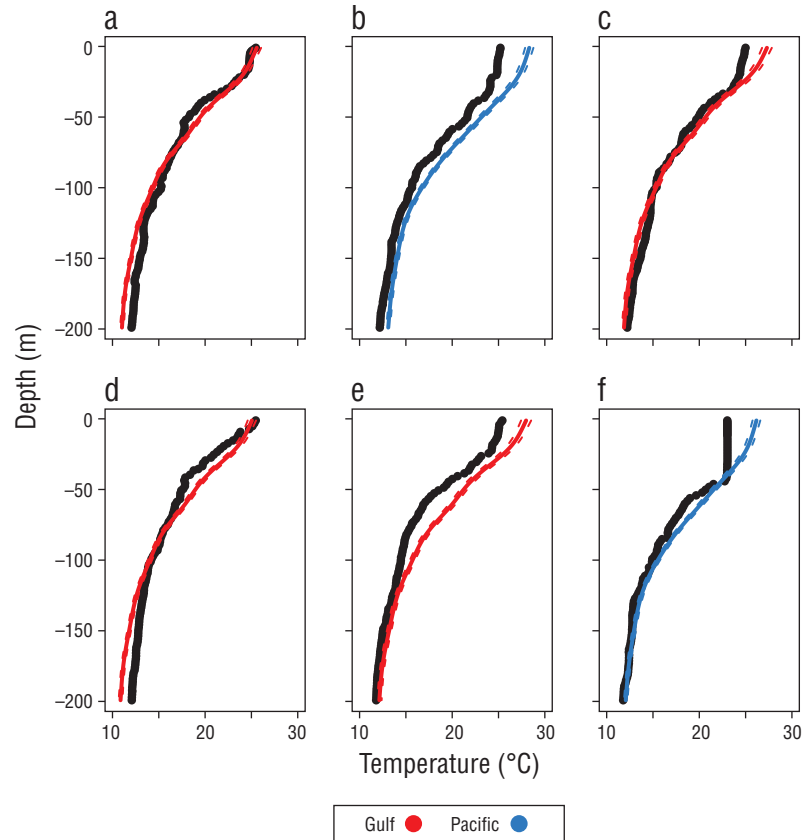


Figure 10. Observed (black dots) and model-predicted (continuous line) temperature profiles that were randomly extracted from the 2017 validation dataset for the Pacific (blue continuous line) and gulf (red continuous line) sides of the study area. The locations and the descriptive statistics of the profiles are shown in Table 3.

Figura 10. Perfiles de temperatura observados (puntos negros) y predichos por el modelo (línea continua) extraídos aleatoriamente de los datos de validación de 2017 para el lado del Pacífico (línea azul continua) y el lado del golfo (línea roja continua) del área de estudio. Las ubicaciones y las estadísticas descriptivas de los perfiles se muestran en la Tabla 3.

strong upwelling events occur during May–June in this area (Zaytsev et al. 2003), and these events are capable of breaking the stratification of the water column. This would explain the fact that stronger stratification in a water column having higher temperatures was observed in the effects plot of the final GAMM. In the study area, thermocline depth is affected by net heat flux and vertical water transport due to wind mixing. The model also suggested that higher temperatures occurred during El Niño events (positive ONI values) and when high SSDT values and negative WSC values were observed. Typical effects of strong El Niño conditions include higher upper-ocean temperatures and an increase in thermocline depth (Collins et al. 2010). Higher SSDT values are related to certain oceanographic features that cause downwelling and a deepening of the thermocline, such as anticyclonic eddies (Domokos et al. 2007), so high SSDT values are associated with higher water temperatures. Positive WSC values are related to upwelling, and negative WSC values are related to downward water transport (Kessler 2006). This behavior appears to be in agreement with the partial effects

remolinos anticiclónicos (Domokos et al. 2007), así que los valores altos de TDSM están asociados con temperaturas del agua más altas. Los valores de WSC positivos están relacionados con la surgencia, y los negativos con un transporte de agua hacia abajo (Kessler 2006). Este comportamiento parece estar en acuerdo con el gráfico de efectos parciales para el WSC, ya que se observó una pendiente negativa en la curva de temperatura promedio vs. WSC. Además, se observaron valores negativos extremos de WSC (hundimiento de agua) mayoritariamente del lado del golfo, con el comportamiento opuesto (valores de surgencia extremos) observado únicamente del lado del Pacífico. Como se afirmó anteriormente, el GC es considerado una cuenca de evaporación y se espera que la estratificación sea más evidente aquí que del lado del Pacífico, una región donde ocurren eventos de surgencia intensos impulsados por el viento que pueden llegar a romper la estratificación de la columna de agua (Zaytsev et al. 2003).

Tanto el porcentaje de desviación explicada (~93%) como el coeficiente de correlación de los datos modelados vs. observados para una base de datos independiente (2017)

plot for WSC, because a negative slope is observed on the mean temperature *vs.* WSC curve. Moreover, extreme negative WSC values (downwelling) were observed mostly for the gulf side, and the opposite (extreme upwelling values) was observed solely for the Pacific side. As stated before, the GC is considered an evaporation basin, and stratification here is expected to be more evident than on the Pacific side, a region with intense wind-driven upwelling events that can break the stratification of the water column (Zaytsev et al. 2003).

Both the percentage of explained deviance (~93%) and the correlation coefficient for modeled *vs.* observed data from the independent (2017) database (~93%) were very satisfactory from the statistical point of view, and the final GAMM reproduced the temperature profiles of the upper 200 m in the study area fairly well. A very similar RMSE (~1.5 °C) was calculated for both the training (2007–2016) and the validation (2017) datasets. This RMSE is similar to that presented by Deng et al. (2011) (1.2–1.8 °C), who used more complicated data assimilation models to predict temperature profiles in the Pacific Ocean. The RMSE calculated in the present work is lower than the RMSE reported by Dorantes-Gilardi (2018) (1.9 °C), who used a coupled physical/biogeochemical model to predict temperature profiles for the west coast of the BCP. Moreover, the deviations for the observed *vs.* predicted curves of the final GAMM were similar to the deviations presented by Dorantes-Gilardi and Rivas (2019), suggesting again that the regression models are tools with an interesting potential to model temperature profiles.

Although the final GAMM was statistically satisfactory, important deviations in the observed *vs.* modeled thermocline depths were observed. For example, the deviations in the modeled thermocline depth were greater with respect to those in the observed thermocline depth when the stratification of the water column was high (thickness of mixed layer ≥ 50 m) on both the Pacific and the Gulf sides (Figs. 9, 10).

Deviations in thermocline depth were also related to high SSTD and high ONI values (see supplementary material). As stated before, higher temperatures and stronger water column stratification are expected to occur when high SSTD and high ONI values are present. Positive SSTD often results in downwelling, and positive ENSO events cause warming of the upper water column. Dorantes-Gilardi and Rivas (2019) found important deviations between observed and modeled temperature profiles for the western coast of the BCP; their study was carried out during the 2013–2016 period, when abnormally warm waters occurred because of a strong ENSO event (2015) and “the Blob” (2014), a massive warm water mass that originated in the Gulf of Alaska in 2013 (Bond et al. 2015) and affected most of the eastern Pacific Ocean, including waters off Baja California (Dorantes-Gilardi and Rivas 2019). Important deviations in observed *vs.* modeled thermocline depths were detected for the Pacific side during 2015 and 2016, when higher-than-normal temperatures

fueron muy satisfactorios desde el punto de vista estadístico, y el GAMM final reprodujo bastante bien los perfiles de temperatura de los 200 m superiores en el área de estudio. Se calculó una RECM (~1.5 °C) muy similar para el conjunto de datos de entrenamiento (2007–2016) y de validación (2017). Este valor de RECM es similar al presentado por Deng et al. (2011) (1.2–1.8 °C), quienes utilizaron modelos más complicados de asimilación de datos para predecir los perfiles de temperatura en el océano Pacífico. La RECM calculada en el presente estudio es más bajo que la RECM reportada por Dorantes-Gilardi (2018) (1.9 °C), quien utilizó un modelo físico/biogeoquímico acoplado para predecir los perfiles de temperatura en la costa oeste de la PBC. Además, las desviaciones de las curvas observadas *vs.* las predichas del GAMM final fueron similares a las desviaciones presentadas por Dorantes-Gilardi y Rivas (2019), lo cual sugiere de nuevo que los modelos de regresión no lineal son herramientas con un interesante potencial para modelar perfiles de temperatura.

Aunque el GAMM final fue estadísticamente satisfactorio, se observaron importantes desviaciones entre la profundidad de la termoclina observada y la modelada. Por ejemplo, las desviaciones en la profundidad de la termoclina modelada con respecto a la profundidad de la termoclina observada fueron mayores cuando la estratificación de la columna de agua fue mayor (espesor de la capa de mezcla ≥ 50 m) tanto en el lado del Pacífico como en el del golfo (Figs. 9, 10).

Las desviaciones en la profundidad de la termoclina también se relacionaron con una TDSM alta y valores altos del ONI (ver material suplementario). Como se mencionó antes, se espera que ocurran temperaturas más altas y una estratificación más fuerte de la columna de agua cuando se presentan valores altos de la TDSM y del ONI. Una TDSM positiva a menudo resulta en hundimiento de aguas superficiales, y eventos positivos del ENOS causan un calentamiento de la estructura de la columna de agua superior. Dorantes-Gilardi y Rivas (2019) encontraron desviaciones importantes entre perfiles de temperatura observados y modelados en la costa occidental de la PBC; su estudio se llevó a cabo en el periodo 2013–2016, cuando se presentaron aguas anormalmente calientes debido a un evento ENOS fuerte (2015) y al evento del “Blob” (2014), una masa muy grande de agua caliente que se originó en el golfo de Alaska en 2013 (Bond et al. 2015) y afectó a gran parte del océano Pacífico oriental, incluso las aguas frente a Baja California (Gilardi y Rivas 2019). Se detectaron importantes desviaciones en la profundidad de la termoclina observada *vs.* la modelada del lado del Pacífico durante 2015 y 2016, años con temperaturas más altas de lo normal debido al evento El Niño de 2015. Las desviaciones entre las observaciones y el modelo podrían ser, entonces, el resultado de una estratificación anormalmente fuerte del lado del Pacífico de la PBC, un fenómeno que no puede ser explicado por el GAMM final, porque la estratificación de la columna de agua del lado del Pacífico de la PBC generalmente no es tan fuerte como la del lado del golfo. Tanto la TDSM como el ONI tuvieron un efecto de “sesgo” sobre las desviaciones

Table 2. Descriptive statistics for the profiles that were randomly chosen from the 2007–2016 database. The letters in the first column to the right match the panels displayed in Figure 9. **Table 2.** Estadísticas descriptivas de los perfiles escogidos aleatoriamente de la base de datos 2007–2016. Las letras en la primera columna a la izquierda corresponden a los paneles de la Figura 9.

Panel	Month	Year	Z _{min} (m)	Z _{max} (m)	Longitude	Latitude	SSDT (m)	WSC (×10 ⁻⁸ Pa)	ONI (°C)	Z _t observed (m)	Z _t predicted (m)	Z _t difference (m)	r
a	Sep	2016	12	199	-107.08	22.92	0.38	-1.53	-0.8	57.68	34.65	23.03	0.97
b	Jun	2016	5	199	-107.80	23.26	0.26	0.04	0.1	14.23	33.97	-19.74	0.96
c	May	2016	1	199	-109.14	24.40	0.22	-1.08	0.6	20.43	34.23	-13.79	0.96
d	Jun	2014	3	199	-108.80	22.62	0.27	-1.96	0.0	76.22	34.00	42.21	0.94
e	Mar	2008	5	198	-109.00	20.26	0.19	-17.30	1.1	53.79	42.01	11.78	0.96
f	Apr	2009	18	194	-111.99	19.19	0.15	0.73	-0.1	73.35	41.87	31.48	0.95
g	May	2015	4	199	-108.99	21.64	0.23	-11.60	0.8	79.14	41.75	36.39	0.97
h	Apr	2009	15	194	-114.25	21.79	0.19	0.54	-0.2	62.68	42.84	19.84	0.96

Z, depth; SSDT, sea surface dynamic topography; wind stress curl; ONI, Oceanic Niño Index.

Table 3. Descriptive statistics for the profiles that were randomly chosen from the 2017 validation database. The letters in the first column to the right match the panels displayed in Figure 10.

Table 3. Estadísticas descriptivas de los perfiles escogidos aleatoriamente de la base de datos de validación de 2017. Las letras en la primera columna a la izquierda corresponden a los paneles de la Figura 10.

Panel	Month	Z _{min} (m)	Z _{max} (m)	Longitude (°W)	Latitude (°N)	SSDT (m)	WSC (×10 ⁻⁸ Pa)	ONI (°C)	Z _t observed (m)	Z _t predicted (m)	Z _t difference (m)	r
a	Apr	1	199	-107.90	22.08	0.19	-2.26	0.4	33.0	35	-2.0	0.99
b	May	3	199	-110.40	19.20	0.32	-0.71	0.4	59.0	41	18.0	0.99
c	Apr	4	199	-107.60	18.62	0.23	-4.36	0.3	35.0	35	0.0	0.98
d	Feb	4	199	-108.40	24.43	0.17	1.94	-0.1	38.5	35	3.5	0.98
e	May	3	199	-107.90	18.50	0.26	-3.58	0.4	27.0	37	-10.0	0.99
f	Mar	1	199	-111.06	21.48	0.28	-2.11	0.4	45.0	41	4.0	0.98

occurred because of the 2015 El Niño event. The deviations between the observations and the model might be the result of abnormally strong stratification on the Pacific side of the BCP, a phenomenon that cannot be accounted for by the final GAMM, because the water column stratification on the Pacific side of the BCP is usually not as strong as it is on the gulf side. SSDT and ONI both had a “biasing” effect on the deviations in the observed vs. modeled thermocline depths, and higher SSDT and ONI values occurred during El Niño 2015, which would explain the larger deviations observed during 2015–2016. Deviations for the gulf side were not as important as the ones observed for the Pacific side (see Fig. 6). This perhaps is explained by the fact that water column stratification is strongest on the gulf (an evaporation basin), as shown by the partial effects plots. The predictions made with the final GAMM for the gulf observations were less biased because the model was “trained” using data of a more stratified water column (profiles carried out on the GC), which perhaps smoothed the effect of the 2015 El Niño on the predictions made for the Gulf side.

The correlation coefficient and the RMSE between the predictions of the final GAMM and the temperature profiles obtained with hydrodynamic models (Copernicus data) were also statistically satisfactory (see Fig. S3). It is noteworthy that, in general, both the Copernicus data and the predictions of the GAMM underestimate thermocline depth, and deviations >100 m were observed in both cases; however, the deviations in observed vs. modeled thermocline depths obtained with the GAMM were around 15 m larger than the deviations of the Copernicus data, which were around 18% of the mean thermocline depth (~ 80 m) in the study area. A plausible explanation for these differences is that, again, the GAMM cannot account for the stratification associated with extreme year-to-year events that act at different spatial and temporal scales (such as “the Blob”), because a variable that accounts for such events is not included in the final GAMM.

Other sources of bias might also be playing an important role on the deviations in the profiles predicted with the final GAMM with respect to the *in-situ* observations and the Copernicus data, such as the uncertainty inherent in satellite data. For example, Fangohr and Kent (2012) suggested deviations on the order of tenths of meters per second when 2 different processing methods were applied to the same wind-derived satellite observations. Dorantes-Gilardi and Rivas (2019) suggested that satellite-derived SSDT could have some bias in observations that are close to the coastline, a bias induced into the SSDT database during the pre-processing stage. Although the bias inherent in satellite data is not easy to quantify, the effect of such bias in the final GAMM is expected to be low because only L4 satellite data (data with the highest processing level) were used in the modeling process.

Another source of bias could be attributed to the fact that monthly mean satellite images were used as predictors in the modeling process. For example, if a CTD cast was carried out

de la profundidad de la termoclina observada vs. la modelada, y se dieron valores más altos de la TDSM y del ONI durante El Niño de 2015, lo cual podría explicar las desviaciones más amplias observadas en 2015–2016. Las desviaciones del lado del golfo no fueron tan importantes como las observadas del lado del Pacífico (ver Fig. 6). Esto tal vez sea explicado por el hecho de que la estratificación de la columna de agua es más fuerte del lado del golfo (una cuenca de evaporación), como lo muestra el gráfico de efectos parciales. Las predicciones hechas con el GAMM final para las observaciones del golfo estuvieron menos sesgadas porque el modelo fue “entrenado” utilizando datos de una columna de agua más estratificada (perfiles llevados a cabo en el GC), lo cual tal vez suavizó el efecto de El Niño de 2015 sobre las predicciones hechas para el lado del golfo.

El coeficiente de correlación y la RECM entre las predicciones del GAMM final y los perfiles de temperatura obtenidos con modelos hidrodinámicos (datos Copernicus) fueron también estadísticamente satisfactorios (véase Fig. S3). Es de notar que, en general, tanto los datos Copernicus como las predicciones del GAMM subestimaron la profundidad de la termoclina, y se observaron desviaciones >100 m en ambos casos; sin embargo, las desviaciones en la profundidad de la termoclina observada vs. la modelada obtenidas con el GAMM fueron aproximadamente 15 m más grandes que las desviaciones de los datos Copernicus, que fueron alrededor del 18% de la profundidad de la termoclina promedio (~ 80 m) en el área de estudio. Una posible explicación de las diferencias mencionadas es que, de nuevo, el GAMM no puede considerar la estratificación asociada con los eventos extremos anuales que actúan a diferentes escalas espaciales y temporales (como el “Blob”), ya que en el GAMM final no se incluyó una variable que pudiera ser utilizada como indicador de tales eventos.

Otras fuentes de sesgo también podrían estar jugando un papel importante en las desviaciones de los perfiles predichos con el GAMM final con respecto a las observaciones *in situ* y a los datos Copernicus, tal como la incertidumbre inherente a los datos satelitales. Por ejemplo, Fangohr y Kent (2012) sugirieron desviaciones del orden de decenas de metros por segundo cuando 2 procesos diferentes fueron aplicados a las mismas observaciones del viento derivadas de satélites. Dorantes-Gilardi y Rivas (2019) sugirieron que la TDSM derivada de satélites podría tener un sesgo en las observaciones cercanas a la línea costera, un sesgo que se induce a la base de datos TDSM durante la fase de preprocesamiento. Aunque el sesgo inherente a la información satelital no es fácil de cuantificar, se esperaría que el efecto de tal sesgo sobre el GAMM final fuera bajo, porque sólo datos satelitales L4 (datos con el nivel de procesamiento más alto) fueron utilizados en el proceso de modelamiento.

Otra fuente de sesgo podría atribuirse al hecho de que se utilizaron imágenes satelitales promedio mensuales como predictores en el proceso de modelamiento. Por ejemplo, si un lance de CTD fue llevado a cabo al principio o a finales

at the beginning or at the end of a month, the environmental conditions that were present in waters adjacent to the CTD cast could somehow be different to the mean conditions for that particular month for that particular zone. Including daily satellite images would perhaps diminish the bias induced when monthly mean satellite data are used. Using daily satellite data in regression models implicates 2 important challenges: (1) daily satellite images are not available for most of the environmental variables included in the final GAMM and (2) the size of the processed databases would increase substantially. An example that illustrates the latter challenge could be drawn from the present work; 132 monthly SSDT images (2007–2017) were processed, which resulted in nearly 2 million (1,856,580) observations. For the same study area, using daily SSDT images (assuming that they are available) would result in a database with over 55 million observations (assuming 30 days per month). Constructing nonlinear regression models with such large datasets could perhaps be impossible for traditional personal computers, highlighting the importance of exploring data-processing algorithms and modeling approaches that are more efficient from the computational point of view.

Even with the above-mentioned limitations, temperature profiles in the study area were fairly well reproduced by an easy-access, non-parametric statistical model. Additionally, the RSME of the final GAMM was comparable to the RMSE obtained with more complicated (and perhaps less available) models, which is encouraging to continue exploring different regression model approaches to predict water temperature profiles. The present paper could serve as a baseline for a research field in modeling seawater properties using nonlinear regression models, a line of research that is currently virtually unexplored.

In conclusion, nonlinear regression models proved to be an interesting and virtually unexplored tool for modeling seawater properties. The final GAMM presented in this paper can be used to predict temperature profiles with a confidence of $\sim 93\%$ and an error of ~ 1.5 °C, providing an alternative approach to the more complex deterministic models. Important deviations in observed *vs.* modeled thermocline depths were observed, and the factors responsible for this behavior are not fully clear. As the amount of oceanographic data stored in public repositories and computing capacity increase, further improvements can be made on the final GAMM, which will surely decrease the uncertainty of the predicted temperature profiles.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the National Council of Science and Technology (CONACYT, Mexico) through the program “Cátedras” (project No. 2137). The valuable aid of Tadashi Kono-Martínez (Universidad Autónoma de Baja California) in the calculation of the wind stress curl is greatly appreciated. The author is grateful to the personnel of

de un mes, las condiciones ambientales presentes en aguas cercanas al lance de CTD serían un poco diferentes a las condiciones promedio para ese mes en particular en esa zona en particular. El incluir imágenes satelitales diarias tal vez disminuiría el sesgo inducido si se utilizan datos satelitales promedio del mes. Utilizar datos satelitales diarios en el modelo de regresión no lineal implica 2 retos importantes: (1) no hay imágenes satelitales diarias disponibles para la mayoría de variables ambientales incluidas en el GAMM final y (2) el tamaño de las bases de datos procesadas aumentaría sustancialmente. Un ejemplo que ilustra este último reto podría sacarse del presente estudio; 132 imágenes de la TDSM mensuales (2007–2017) fueron procesadas, lo cual resultó en casi 2 millones (1,856,580) de observaciones. Para la misma área de estudio, utilizar imágenes de la TDSM diarias (suponiendo que estén disponibles) resultaría en una base de datos de más de 55 millones de observaciones (suponiendo 30 días por mes). Construir un modelo de regresión no lineal con bases de datos tan grandes sería tal vez imposible para las computadoras personales tradicionales, lo cual resalta la importancia de la exploración de algoritmos de procesamiento de datos y aproximaciones de modelamiento que sean más eficientes desde el punto de vista computacional.

Aún con las limitantes ya mencionadas, los perfiles de temperatura del área de estudio fueron reproducidos bastante bien por un modelo estadístico no paramétrico de fácil acceso. Adicionalmente, la RECM del GAMM final fue comparable a la RECM obtenida con modelos más complicados (y tal vez menos disponibles), lo cual es alentador para continuar con la exploración de diferentes enfoques de los modelos de regresión no lineal para predecir perfiles de temperatura del agua. El presente manuscrito podría servir como una línea de base para el campo de investigación del modelamiento de las propiedades del agua de mar utilizando un modelo de regresión no lineal, una línea de investigación que actualmente está virtualmente inexplorada.

En conclusión, el modelo de regresión no lineal resultó ser una herramienta interesante y virtualmente inexplorada para modelar las propiedades del agua de mar. El GAMM final presentado en este artículo podría ser utilizado para predecir perfiles de temperatura con una confianza del $\sim 93\%$ y un error de ~ 1.5 °C, lo que brinda un enfoque alternativo a los modelos determinísticos más complejos. Se observaron desviaciones importantes en la profundidad de la termoclina observada *vs.* la modelada, y los factores responsables de este comportamiento no son del todo claros. Al ir aumentando la cantidad de datos oceanográficos almacenados en repositorios públicos, así como la capacidad computacional, se podrán hacer mejoras al GAMM final, que seguramente disminuirán la incertidumbre de los perfiles de temperatura predichos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo contó con el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) de México a través

NOAA's ERDDAP program for their attention and valuable effort on providing a public, easy-to-use, and very complete data repository. The author also thanks the valuable comments of 3 anonymous reviewers that helped to improve the quality of this paper. The author declares no conflict of interest.

REFERENCES

- Akbari E, Alavipanah SK, Jeihouni M, Hajeb M, Haase D, Alavipanah S. 2017. A review of Ocean/Sea subsurface water temperature studies from remote sensing and non-remote sensing methods. *Water*. 9(12):936.
<https://doi.org/10.3390/w9120936>
- Álvarez-Borrego S. 1983. Gulf of California. In: Ketchum BH (ed.), *Estuaries and enclosed seas*. Amsterdam (Netherlands): Elsevier. p. 427–449.
- Bond NA, Cronin MF, Freeland H, Mantua N. 2015. Causes and impacts of the 2014 warm anomaly in the NE Pacific. *Geophys Res Lett*. 42(9):3414–3420.
<https://doi.org/10.1002/2015GL063306>
- Burnham KP, Anderson DR. 2002. *Model selection and multimodel inference: a practical and information-theoretic approach*. 2nd ed. Berlin (Germany): Springer-Verlag. 488 p.
<https://doi.org/10.1007/b97636>
- Castro R, Durazo R, Mascarenhas A, Collins CA, Trasviña A. 2006. Thermohaline variability and geostrophic circulation in the southern portion of the Gulf of California. *Deep-Sea Res PT I*. 53(1):188–200.
<https://doi.org/10.1016/j.dsr.2005.09.010>
- Castro R, Lavín MF, Ripa P. 1994. Seasonal heat balance in the Gulf of California. *J Geophys Res*. 99(C2):3249–3261.
<https://doi.org/10.1029/93JC02861>
- Collins M, An S, Cai W, Ganachaud A, Guilyardi E, Jin F, Jochum M, Lengaigne M, Power S, Timmermann A, et al. 2010. The impact of global warming on the tropical Pacific Ocean and El Niño. *Nat Geosci*. 3:391–397.
<https://doi.org/10.1038/ngeo868>
- Deng Z, Tang Y, Freeland HJ. 2011. Evaluation of several error schemes in the EnKF assimilation: Applied to Argo profiles in the Pacific Ocean. *J Geophys Res*. 116(C9):C09027.
<https://doi.org/10.1029/2011JC006942>
- Domokos R, Seki MP, Polovina JJ, Hawn DR. 2007. Oceanographic investigation of the American Samoa albacore (*Thunnus alahunga*) habitat and longline fishing grounds. *Fish Oceanogr*. 16(6):555–572.
<https://doi.org/10.1111/j.1365-2419.2007.00451.x>
- Dorantes-Gilardi M. 2018. *Modelación numérica de variables biogeoquímicas en la región sur de la Corriente de California durante el período anómalo cálido 2013–2015* [MSc thesis]. [Ensenada (Mexico)]: Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada. 64 p.
- Dorantes-Gilardi M, Rivas D. 2019. Effects of the 2013–2016 Northeast Pacific warm anomaly on physical and biogeochemical variables off northwestern Baja California, derived from a numerical NPZD model. *Deep-Sea Res PT II*. 169–170:104668.
<https://doi.org/10.1016/j.dsr2.2019.104668>
- Emmett RL, Brodeur RD, Miller TW, Pool SS, Krutzikowsky GK, Bentley PJ, McCrae J. 2005. Pacific sardine (*Sardinops sagax*) abundance, distribution, and ecological relationships in the Pacific Northwest. *CalCOFI Rep*. 46:122–143.
- Fangohr S, Kent EC. 2012. An estimate of structural uncertainty in QuikSCAT wind vector retrievals. *J Appl Meteorol Clim*. 51(5):954–961.
<https://doi.org/10.1175/JAMC-D-11-0183.1>
- del programa “Cátedras” (proyecto No. 2137). La valiosa ayuda de Tadashi Kono-Martínez (Universidad Autónoma de Baja California) en el cálculo del rotacional del esfuerzo del viento es muy apreciada. El autor agradece al personal del programa ERDDAP de la NOAA por su atención y valiosos esfuerzos por proveer un repositorio de datos público, muy completo y de fácil uso. El autor también agradece los valiosos comentarios de 3 revisores anónimos que ayudaron a mejorar la calidad de este artículo. El autor declara que no hay conflictos de interés.
-
- Farrell ER, Boustany AM, Halpin PN, Hammond DL. 2014. Dolphin (*Coryphaena hippurus*) distribution in relation to biophysical ocean conditions in the northwest Atlantic. *Fish Res*. 151:177–190.
<https://doi.org/10.1016/j.fishres.2013.11.014>
- Fiedler PC. 1988. Surface manifestations of subsurface thermal structure in the California Current. *J Geophys Res*. 93(C5):4975–4983.
<https://doi.org/10.1029/JC093iC05p04975>
- Fiedler PC, Talley LD. 2006. Hydrography of the eastern tropical Pacific: A Review. *Prog Oceanogr*. 69(2–4):143–180.
<https://doi.org/10.1016/j.pocean.2006.03.008>
- Godínez VM, Beier E, Lavín MF, Kurczyn JA. 2010. Circulation at the entrance of the Gulf of California from satellite altimeter and hydrographic observations. *J Geophys Res*. 115(C4):C04007.
<https://doi.org/10.1029/2009JC005705>
- Gómez-Ocampo E, Gaxiola-Castro G, Durazo R. 2017. Approach for estimating the dynamic physical thresholds of phytoplankton production and biomass in the tropical-subtropical Pacific Ocean. *J Geophys Res–Biogeo*. 122(6):1385–1403.
<https://doi.org/10.1002/2016JG003636>
- Holland KN, Brill RW, Chang RKC. 1990. Horizontal and vertical movements of blue marlin captured and released using sportfishing gear. *Fish Bull*. 88(2):397–402.
- Jones MR, Blenkinsop S, Fowler HJ, Stephenson DB, Kilsby CG. 2013. *Generalized additive modelling of daily precipitation extremes and their climatic drivers*. Boulder (CO): National Center for Atmospheric Research. 35 p. NCAR Technical Notes No. NCAR/TN-501+STR.
<https://doi.org/10.5065/D68P5XH3>
- Kelley D, Richards C. 2017. oce: Analysis of oceanographic data. [place unknown]: CRAN R project; [accessed 2020 October 20]. <https://CRAN.R-project.org/package=oce>
- Kessler WS. 2006. The circulation of the eastern tropical Pacific: A review. *Progr Oceanogr*. 69(2–4):181–217.
<https://doi.org/10.1016/j.pocean.2006.03.009>
- Large WG, Pond S. 1981. Open ocean momentum flux measurements in moderate to strong winds. *J Phys Oceanogr*. 11(3):324–336.
[https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1981\)011<0324:OOMFMI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1981)011<0324:OOMFMI>2.0.CO;2)
- Lavín MF, Marinone SG. 2003. An overview of the physical oceanography of the Gulf of California. In: Velasco-Fuentes OU, Sheinbaum J, Ochoa J (eds.), *Nonlinear processes in geophysical fluid dynamics*. Dordrecht (Netherlands): Springer. p. 173–204.
https://doi.org/10.1007/978-94-010-0074-1_11
- Lynn RJ, Simpson JJ. 1987. The California Current system: The seasonal variability of its physical characteristics. *J Geophys Res*. 92(C12):12947–12966.
<https://doi.org/10.1029/jc092ic12p12947>

- Marín-Enríquez E, Seoane J, Muhlia-Melo A. 2018. Environmental modeling of the occurrence of dolphinfish (*Coryphaena* spp.) in the Pacific Ocean off Mexico reveals seasonality in abundance, hot spots and migration patterns. *Fish Oceanogr.* 27(1):28–40. <https://doi.org/10.1111/fog.12231>
- Martínez-Rincón RO, Ortega-García S, Vaca-Rodríguez JG. 2012. Comparative performance of generalized additive models and boosted regression trees for statistical modeling of incidental catch of wahoo (*Acanthocybium solandri*) in the Mexican tuna purse-seine fishery. *Ecol Model.* 233:20–25. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2012.03.006>
- Maunder MN, Punt AE. 2004. Standardizing catch and effort data: a review of recent approaches. *Fish Res.* 70(2–3):141–159. <https://doi.org/10.1016/j.fishres.2004.08.002>
- R Core Team. 2016. R: A language and environment for statistical computing. Vienna (Austria): R Foundation for Statistical Computing; [accessed 2019 March 30]. <https://www.R-project.org>.
- Richards RG, Tomlinson R, Chaloupka M. 2010. Using generalized additive models to assess, explore and unify environmental monitoring datasets. In: Swayne DA, Yang W, Voinov AA, Rizzoli A, Filatova T (eds.), *iEMSs 2010: Modelling for Environment's Sake*. Proceedings of the Fifth Biennial Conference of the International Environmental Modelling and Software Society; 5–8 Jul 2010 Ottawa, Ontario, Canada. Canada: International Environmental Modelling and Software Society. 8 p.
- Simmons RA. 2017. ERDDAP. Monterey (CA): National Oceanic and Atmospheric Administration, National Marine Fisheries Service, Southwest Fisheries Science Center Environmental Research Division; [accessed 2019 July 4]. <https://coastwatch.pfeg.noaa.gov/erddap>
- Su NJ, Sun CL, Punt AE, Yeh SZ. 2008. Environmental and spatial effects on the distribution of blue marlin (*Makaira nigricans*) as inferred from data for longline fisheries in the Pacific Ocean. *Fish Oceanogr.* 17(6):432–445. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2419.2008.00491.x>
- Torres-Orozco E. 1993. Análisis volumétrico de las masas de agua del Golfo de California [MSc thesis]. [Ensenada (Mexico)]: Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada. 80 p.
- Torres-Orozco E, Trasviña A, Muhlia-Melo A, Ortega-García S. 2005. Dinámica de mesoescala y capturas de atún aleta amarilla en el Pacífico mexicano = Mesoscale dynamics and yellowfin tuna catches in the Mexican Pacific. *Cienc Mar.* 31(4):671–683. <https://doi.org/10.7773/cm.v31i4.33>
- Wood SN. 2006. Generalized additive models: An introduction with R. Boca Raton (FL): Chapman and Hall/CRC. 410 p.
- Yang J, Gong P, Fu R, Zhang M, Chen J, Liang S, Xu B, Shi J, Dickinson R. 2013. The role of satellite remote sensing in climate change studies. *Nat Clim Chang.* 3:875–883. <https://doi.org/10.1038/nclimate1908>
- Yang L, Qin G, Zhao N, Wang C, Song G. 2012. Using a Generalized Additive Model with autoregressive terms to study the effects of daily temperature on mortality. *BMC Med Res Methodol.* 12:165. <https://doi.org/10.1186/1471-2288-12-165>
- Zainuddin M, Saitoh K, Saitoh S. 2008. Albacore (*Thunnus alalunga*) fishing ground in relation to oceanographic conditions in the western North Pacific Ocean using remotely sensed satellite data. *Fish Oceanogr.* 17(2):61–73. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2419.2008.00461.x>
- Zamudio L, Hogan P, Metzger EJ. 2008. Summer generation of the Southern Gulf of California eddy train. *J Geophys Res.* 113(C6):C06020. <https://doi.org/10.1029/2007JC004467>
- Zaytsev O, Cervantes-Duarte R, Montante O, Gallegos-García A. 2003. Coastal upwelling activity on the Pacific shelf of the Baja California Peninsula. *J Oceanogr.* 59(4):498–502. <https://doi.org/10.1023/A:1025544700632>
- Zuur AF, Ieno EN, Walker NJ, Saveliev AA, Smith GM. 2009. Mixed effects models and Extensions in Ecology with R. New York: Springer-Verlag. 574 p.

Received 26 June 2019,
accepted 5 December 2020.

SUPPLEMENTARY MATERIAL

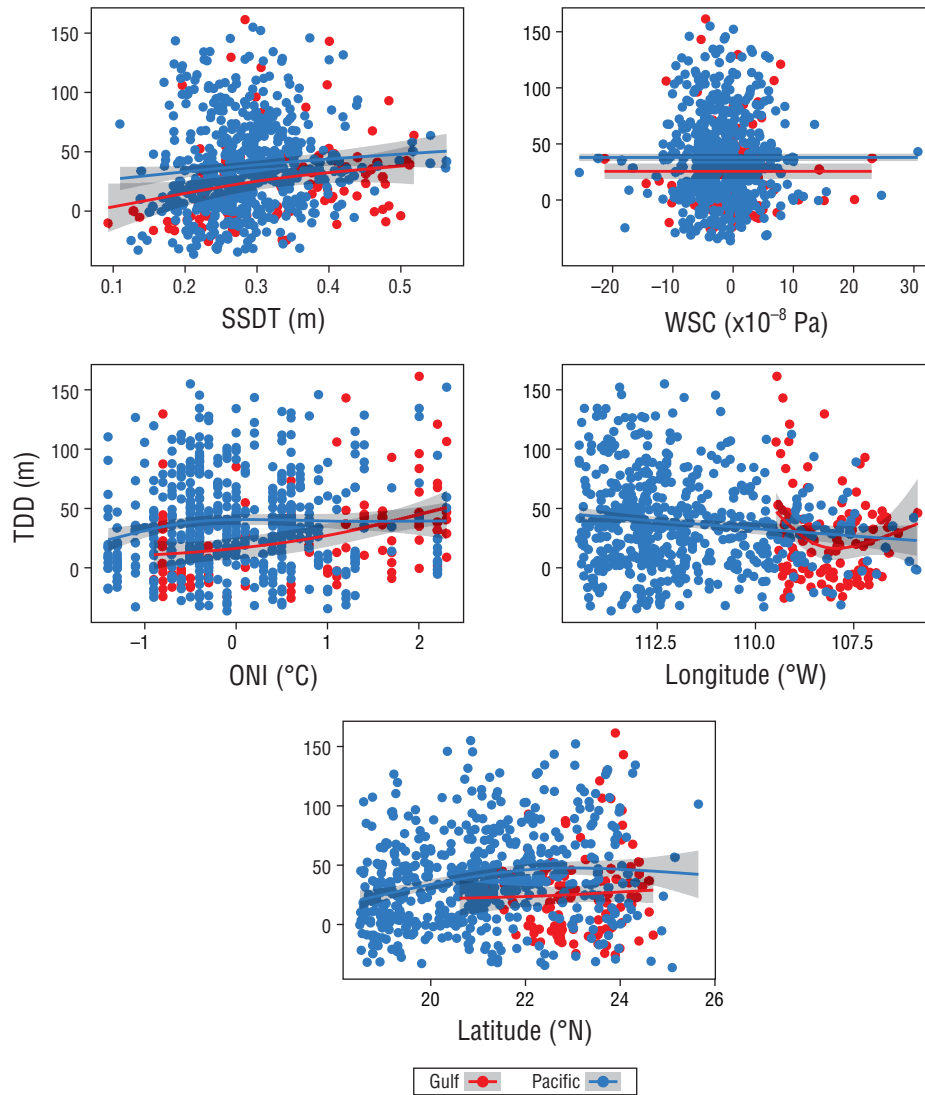


Figure S1. Relationship between thermocline depth differences (TDD; observed minus modeled thermocline depth) and the environmental and spatial covariates for the data used to fit the generalized additive mixed model (June 2007 through November 2016). SSDT, sea surface dynamic topography; WSC, wind stress curl; ONI, Oceanic Niño Index.

Figura S1. Relación entre las diferencias en la profundidad de la termoclina (TDD; profundidad de la termoclina observada menos la modelada) y las covariables ambientales y espaciales de los datos utilizados para ajustar el modelo mixto aditivo generalizado (junio de 2007 a noviembre de 2016).

SUPPLEMENTARY MATERIAL

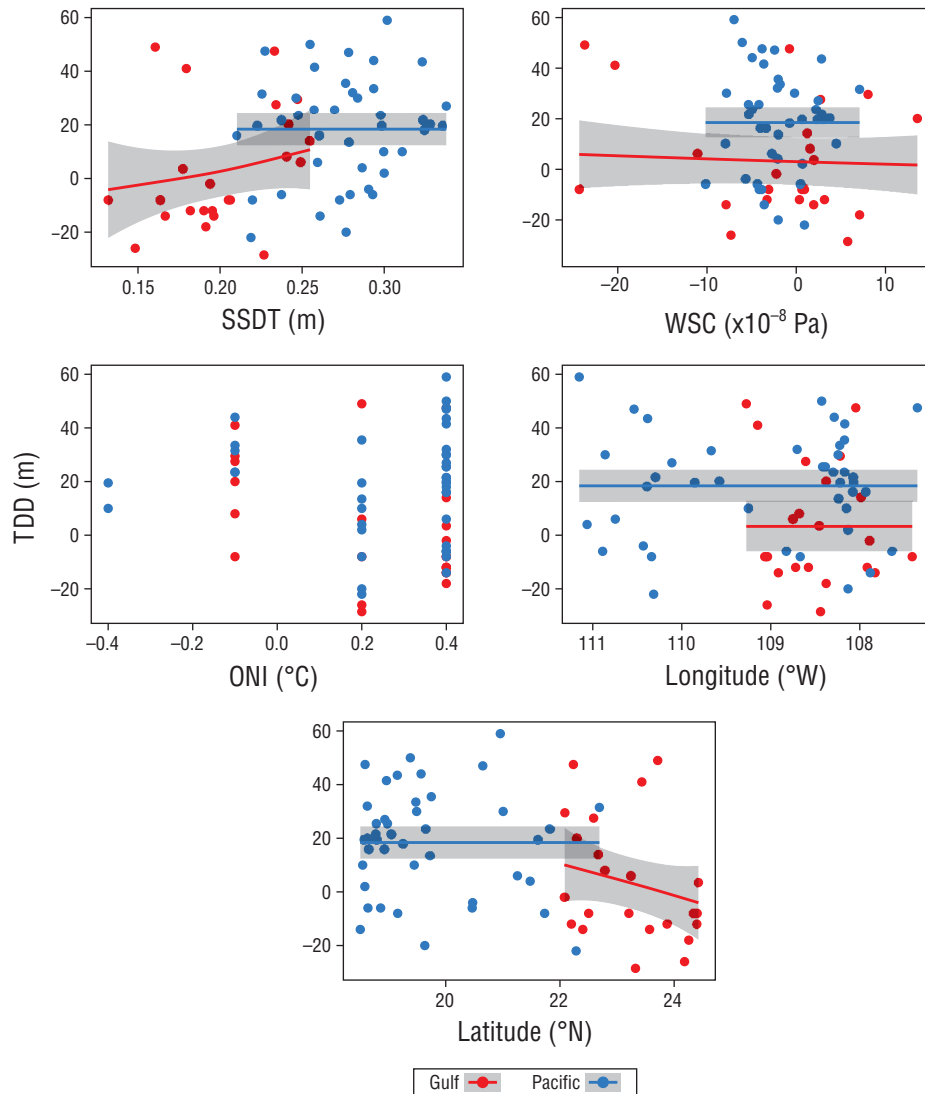


Figure S2. Relationship between thermocline depth differences (TDD; observed minus modeled thermocline depth) and the environmental and spatial covariates for the data used to validate the generalized additive mixed model (2017). SSDT, sea surface dynamic topography; WSC, wind stress curl; ONI, Oceanic Niño Index.

Figura S2. Relación entre las diferencias en la profundidad de la termoclina (TDD; profundidad de la termoclina observada menos la modelada) y las covariables ambientales y espaciales de los datos utilizados para validar el modelo mixto aditivo generalizado (2017).

SUPPLEMENTARY MATERIAL

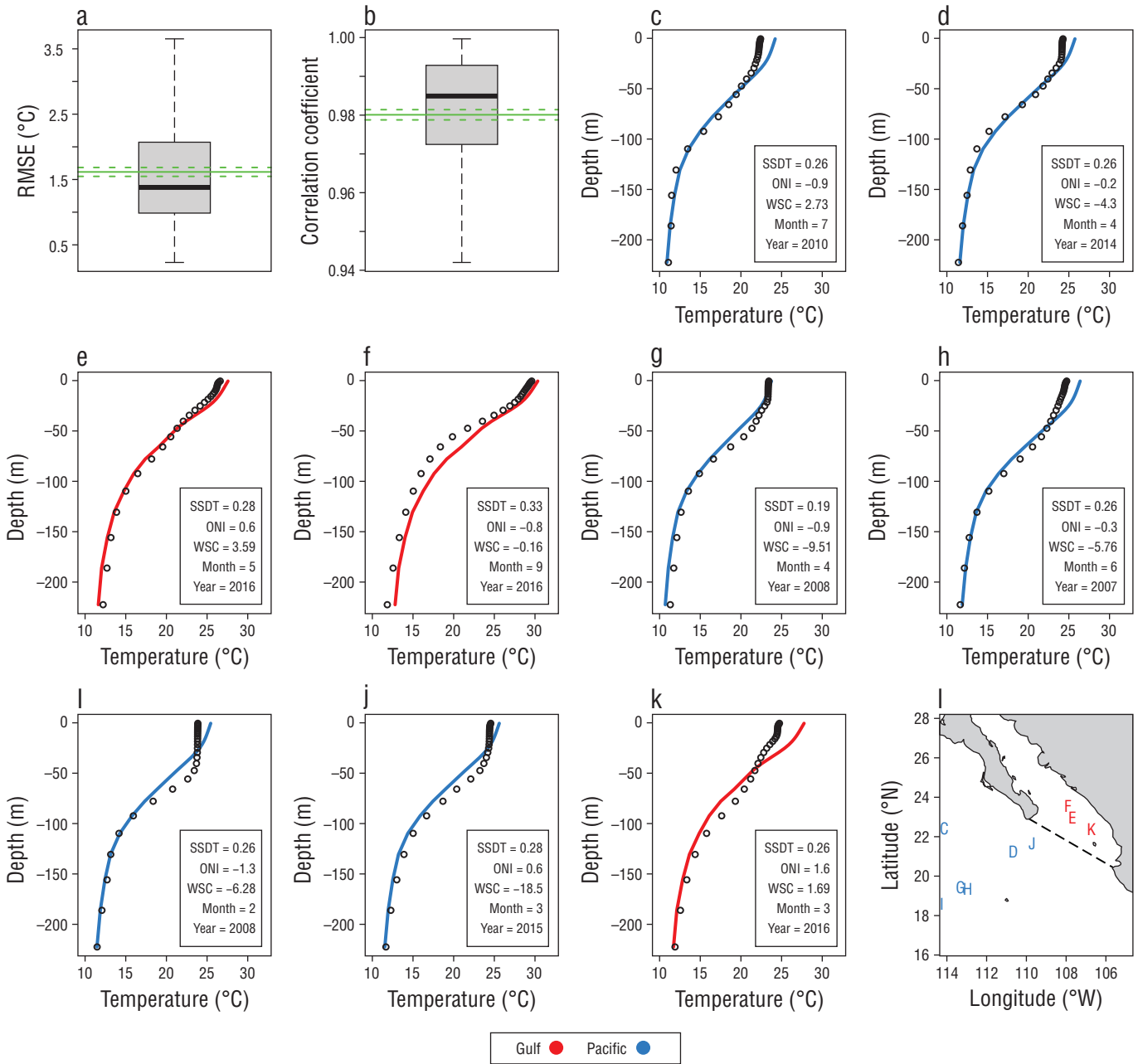


Figure S3. Root-mean-square error (RMSE) (a), correlation coefficient (b), profiles randomly extracted for the data obtained from Copernicus (open circles) (c–k), and profiles predicted with the final generalized additive mixed model (solid line) (c–k) for the Pacific (blue) and Gulf (red) sides of the study area. Green solid line and broken green lines in panels a and b depict the mean and the 95% confidence intervals of the mean, respectively. The location of each profile in panels c–k is shown in panel l in matching letters.

Figura S3. Raíz del error cuadrático medio (RMSE) (a), coeficiente de correlación (b), perfiles extraídos aleatoriamente para los datos obtenidos de Copernicus (círculos abiertos) (c–k) y perfiles predichos con el modelo mixto aditivo generalizado final (línea sólida) (c–k) para el lado del Pacífico (azul) y el lado del golfo (roja) del área de estudio. La línea sólida verde y las líneas discontinuas verdes en los paneles a y b muestran el promedio y los intervalos de confianza del 95%, respectivamente. La ubicación de cada perfil en los paneles c–k se muestra en el panel l con letras correspondientes.

SUPPLEMENTARY MATERIAL

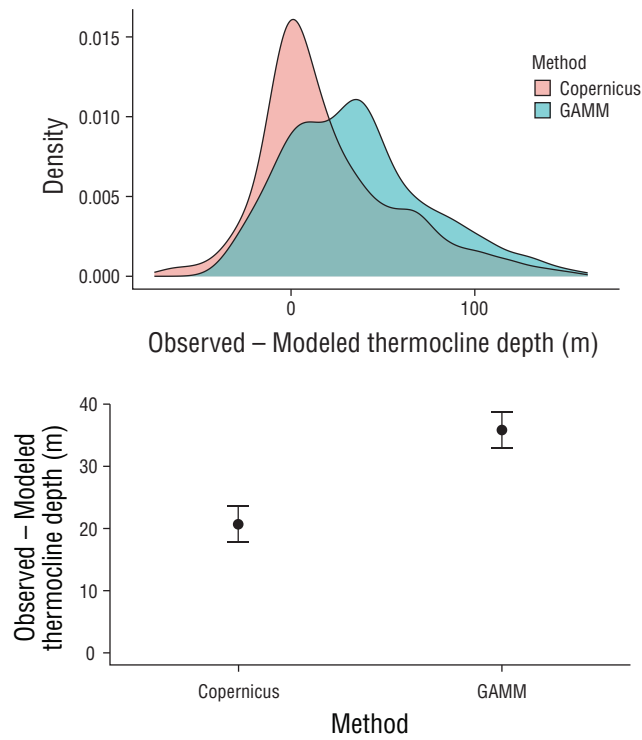


Figure S4. Differences in thermocline depth (observed minus modeled) for the final generalized additive mixed model (GAMM) and the Copernicus data. Top: Kernel density curves; bottom: mean difference (in meters) with associated 95% confidence intervals.

Figura S4. Diferencias en la profundidad de la termoclina (observada menos modelada) para el modelo mixto aditivo generalizado final y para los datos Copernicus. Arriba: curvas de densidad Kernel; abajo: diferencia promedio (en metros) con intervalos de confianza del 95% asociados.