

# Dynamique des producteurs primaires dans le modèle de biogéochimie aquatique RIVE unifié

Shuaitao Wang<sup>1\*</sup>, Vincent Thieu<sup>1</sup>, Nicolas Flipo<sup>2</sup>, Marie Silvestre<sup>3</sup>, Gilles Billen<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UMR 7619 METIS, Sorbonne Université, CNRS, EPHE, Paris

<sup>2</sup> Centre de Géosciences, MINES ParisTech, PSL Université, Fontainebleau

<sup>3</sup> FR3020 FIRE, Sorbonne Université, CNRS, Paris

\* shuaitao.wang@sorbonne-université.fr

## Résumé

*Le modèle de biogéochimie aquatique RIVE coexiste au sein de plusieurs modèles développés dans le cadre du programme PIREN-Seine (pyNuts-RiverStrahler, ProSe-PA, Barman, etc.). L'évolution parallèle de ces codes, les adaptations numériques aux langages de programmation (Python pour pyRIVE et ANSI C pour C-RIVE) et l'ajout de fonctionnalités depuis plus de 30 ans de recherche au sein du PIREN-Seine posent la question de leur comparabilité et de leur compatibilité. Ce travail s'inscrit ainsi dans le projet d'unification des codes de RIVE.*

*Dans ce rapport, les dynamiques des producteurs primaires implémentées dans la version de RIVE en Python (pyRIVE) et la version de RIVE en ANSI C (C-RIVE) sont explorées. Les équations des processus relatives aux producteurs primaires ainsi que les valeurs des paramètres sont d'abord décrites. Ensuite, un cas d'étude théorique en « bassine » a été construit pour réaliser des simulations en conditions contrôlées avec pyRIVE et C-RIVE. L'exercice montre que pyRIVE et C-RIVE simulent des concentrations similaires en phytoplanctons et en éléments nutritifs. Les équations décrites dans ce rapport peuvent donc servir à créer une conceptualisation unifiée du modèle de biogéochimie aquatique RIVE.*

*L'adaptation de cette version unifiée de RIVE dans le programme pyNuts-RiverStrahler sera également réalisée par un calcul de la concentration moyenne de chaque variable d'état. Ce calcul des concentrations moyennes remplacera le calcul du taux de croissance moyen journalier dans la version actuelle de pyRIVE qui, en l'état, surestime la croissance des phytoplanctons pendant les phases de croissance des efflorescences algales.*

## Points clefs

- ✓ Description de la biomasse d'un phytoplancton et des formulations relatives aux dynamiques des producteurs primaires dans le modèle de biogéochimie RIVE
- ✓ pyRIVE et C-RIVE peuvent simuler les concentrations des phytoplanctons et des éléments nutritifs similaires
- ✓ Conceptualisation unifiée du modèle de biogéochimie aquatique RIVE

## Abstract

The aquatic biogeochemistry model RIVE coexists within several models developed at PIREN-Seine (pyNuts-RiverStrahler, ProSe-PA, Barman etc.). The parallel evolution of these codes, the numerical adaptations of programming languages (Python for pyRIVE and ANSI C for C-RIVE), the addition of functionality for more than 30 years of research within PIREN-Seine raise the question of the comparability and compatibility. This work is part of the unification of RIVE codes project.

In this report, the dynamics of primary producers implemented in pyRIVE (Python version) and in C-RIVE (ANSI C version) are explored. The equations related to primary producers' process as well as the parameter values are first described. Then, a theoretical "basin" case study was built to perform simulations with pyRIVE and C-RIVE under controlled conditions. This numerical experience shows that pyRIVE and C-RIVE simulate the similar concentrations of phytoplankton and nutrients. Equations described in this report can therefore be used to create a unified conceptualization of the RIVE aquatic biogeochemistry model.

The adaptation of this unified version of RIVE in the pyNuts-RiverStrahler program will also be achieved by calculating the average concentration of each state variable. This calculation of average concentrations will replace the calculation of the daily average growth rate in the current version of pyRIVE which overestimates the growth of phytoplankton during the start of an algal bloom event.

## Key points

- ✓ Description of the biomass of a phytoplankton and formulations relating to the dynamics of primary producers in the biogeochemistry model RIVE
- ✓ pyRIVE and C-RIVE can simulate the similar concentrations of phytoplankton and nutrients
- ✓ Unified conceptualization of the aquatic biogeochemistry model RIVE

## Introduction

Le modèle de biogéochimie aquatique RIVE a été développé en 1994 (Billen et al., 1994). Il existe au sein de plusieurs modèles développés dans le cadre du programme PIREN-Seine pour décrire le fonctionnement biogéochimique des réseaux hydrographiques (pyNuts-RiverStrahler, Billen et al., 1994), des milieux stagnants type barrage-réservoir (Barman, Garnier et al., 2000) ou encore le fonctionnement hydro-biodynamique de la Seine depuis l'amont de l'agglomération parisienne jusqu'à l'estuaire à Poses (ProSe-PA, Wang (2019), Wang et al., (2019), Wang et al. (2021)). L'évolution parallèle de ces codes, les adaptations numériques aux langages de programmation (Python pour pyRIVE et ANSI C pour C-RIVE) et l'ajout de fonctionnalités depuis plus de 30 ans de recherche au sein du PIREN-Seine posent la question de leur comparabilité et de leur compatibilité.

Un projet d'unification des codes de RIVE est en cours dans la phase 8 du PIREN-Seine. La modélisation RIVE progresse aujourd'hui vers une version « unifiée », rassemblant l'ensemble des développements récents, et visant à renforcer la collaboration des équipes de recherche impliquées dans le développement du modèle. La représentation de la matière organique et de sa dégradation dans les milieux aquatiques dans pyRIVE et C-RIVE a été récemment explorée (Wang et al., 2020). Il est à présent nécessaire de comparer les dynamiques des producteurs primaires dans les deux codes afin de proposer une conceptualisation unifiée du modèle RIVE. Ce rapport présente d'abord la composition de la biomasse d'un phytoplancton et ensuite les équations des processus relatifs aux producteurs primaires. Enfin, un cas « bassine » a été construit pour réaliser les simulations en conditions contrôlées avec pyRIVE et C-RIVE et pouvoir comparer les simulations produites.

## 1. Les producteurs primaires dans le modèle de biogéochimie RIVE unifié

Le comportement des producteurs primaires est représenté à l'aide du modèle AQUAPHY (Lancelot et al., 1991). Les biomasses phytoplanctoniques sont représentées par trois constituants cellulaires différents (Fig. 1) :

- Les protéines, qui sont les macromolécules constitutives de la cellule, F ;
- Les glucides et les lipides jouant le rôle de produits de réserve, R ;
- Les acides aminés, petites molécules précurseurs de la synthèse des protéines, S.

À tout moment, la biomasse totale d'une espèce phytoplanctonique  $p$  est égale à la somme des trois constituants internes (Eq. 1).

$$[PHY]_p = [F]_p + [R]_p + [S]_p \quad (1)$$

Dans la pratique, la biomasse totale d'une espèce phytoplanctonique est obtenue via la concentration en chlorophylle  $a$ . Un ratio carbone/chlorophylle  $a$  de 35 mgC/ $\mu$ gchl $a$  est utilisé pour convertir la concentration en chlorophylle  $a$  ( $\mu$ gchl $a$ ) en biomasse phytoplanctonique (mgC). Les macromolécules constitutives de la cellule (F) comptent pour environ 85% de la biomasse totale, tandis que les produits de réserve (R) comptent pour environ 10% de la biomasse totale (Lancelot et al., 1991). Le reste (5%) de la biomasse totale constitue les petits précurseurs (S) de la synthèse des protéines (F). Dans la version actuelle de pyRIVE, on utilise un ratio  $\frac{[S]}{[F]} = \frac{[R]}{[F]} = 0.1$ . Dans C-RIVE, ce ratio est calculé dynamiquement à chaque pas de temps en fonction de l'intensité des différents processus simulés.

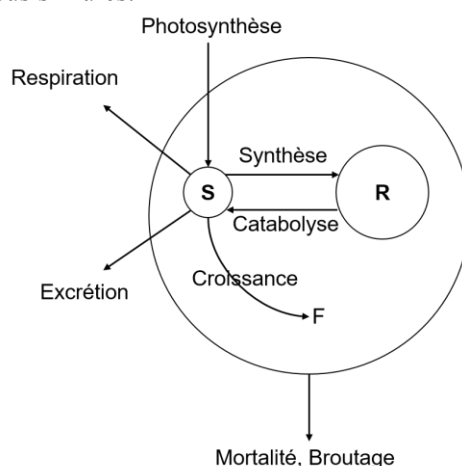


Figure 1. Composition du phytoplancton et processus relatifs aux producteurs primaires.

## 2. Les processus relatifs aux producteurs primaires

Dans cette section, les processus relatifs aux phytoplanctons sont décrits de façon exhaustive. Les propriétés des phytoplanctons sont représentées par les paramètres physiologiques (taux de croissance, taux de photosynthèse, etc.). Certains paramètres dépendant de la température, une fonction de température  $ftp$  est définie (Eq. (2)).

$$ftp = e^{-\frac{(T-T_{opt})^2}{\sigma^2}} \quad (2)$$

Avec  $T_{opt}$  : Température optimale, [°C]

$\sigma$  : Ecart-type de la fonction de température, [°C]

Les valeurs des paramètres physiologiques à la température  $T$  sont égales aux valeurs des paramètres à la température optimale  $f(T_{opt})$  (maximal de  $f$ ) multipliées par cette fonction de température  $ftp$  (Eq. (3)).

$$f(T) = ftp \times f(T_{opt}) \quad (3)$$

## 2.1. Photosynthèse

La production primaire suit la relation photosynthèse-irradiance suivante (Platt et al., 1977) :

$$P(z) = P_{max} \left(1 - e^{-\frac{\alpha I(z)}{P_{max}}}\right) e^{-\frac{\beta I(z)}{P_{max}}} \quad (4)$$

Avec  $P_{max}$  : Taux de photosynthèse maximal, [ $\text{h}^{-1}$ ]

$\alpha$  : Capacité photosynthétique, [ $\text{h}^{-1}(\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})^{-1}$ ]

$\beta$  : Capacité de photoinhibition [ $\text{h}^{-1}(\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})^{-1}$ ], 0  $\text{h}^{-1}(\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})^{-1}$  par défaut

$I(z)$  : Rayonnement photosynthétique actif à la profondeur  $z$ , [ $\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]

L'irradiance suit la loi de Beer-Lambert :

$$I(z) = I_0 e^{-\eta z} \quad (5)$$

Avec  $I_0$  : Rayonnement photosynthétique actif à la surface de l'eau, [ $\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]

$\eta$  : Coefficient d'extinction lumineuse, [ $\text{m}^{-1}$ ]

Le rayonnement photosynthétique actif à la surface de l'eau est soit fourni directement par l'utilisateur, soit il suit une fonction sigmoïdale :

$$I_0 = \frac{\pi}{2} \times \text{luminosity} \times \sin\left(\frac{\pi \times h}{\text{photoperiod}}\right) \quad (6.1)$$

$$\text{luminosity} = \text{luminosity}_{average} \times (1 - \text{luminosity}_{range} \times \cos(2\pi \frac{\text{ind}_{day}}{365})) \quad (6.2)$$

$$\text{photoperiod} = \text{photoperiod}_{average} \times (1 - \text{photoperiod}_{range} \times \cos(2\pi \frac{\text{ind}_{day}}{365})) \quad (6.2)$$

Avec  $\text{luminosity}$  : Luminosité solaire, [ $\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]

$h$  : Heure dans une journée, 0 - 23, [h]

$\text{ind}_{day}$  : Jour julien<sup>1</sup> pour une année, [-]

$\text{luminosity}_{average}$  : Luminosité solaire moyenne sur l'année, [ $\mu\text{E} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]

$\text{luminosity}_{range}$  : Amplitude des luminosités solaires sur l'année, [-]

$\text{photoperiod}$  : Photopériode, [h]

$\text{photoperiod}_{average}$  : Moyenne des photopériodes sur l'année, [h]

$\text{photoperiod}_{range}$  : Amplitude des photopériodes sur l'année, [-]

Le coefficient d'extinction lumineuse ( $\eta$ ) est constitué de trois termes :

$$\eta = \eta_{base} + \eta_{chla}[\text{chla}] + \eta_{mes}[\text{MES}] \quad (7)$$

Avec  $\eta_{base}$  : Coefficient d'extinction lumineuse pour l'eau pure, [ $\text{m}^{-1}$ ]

$\eta_{chla}$  : Coefficient d'extinction lumineuse dû à l'auto-ombrage, [ $\text{m}^{-2} \cdot \mu\text{gchla}$ ]

$\eta_{mes}$  : Coefficient d'extinction lumineuse dû aux matières en suspension, [ $\text{m}^{-2} \cdot \text{g}$ ]

Dans le modèle RIVE, le carbone fixé dans la cellule par la photosynthèse correspond aux petits précurseurs (S) de la synthèse des protéines (Fig. 1). Le bilan de S est donc :

$$\Delta S = \left( \frac{\int P(z) dz}{h} \right) \times [F] \times dt \quad (8)$$

<sup>1</sup> Un système de datation consistant à compter le nombre de jours depuis une date. Ici, avec le premier janvier de l'année = 0.

## 2.2. Croissance

Quant à la croissance du phytoplancton, il s'agit de la transformation des petites molécules S en macromolécules F (Fig. 1), qui nécessite également de prélever des éléments nutritifs (N, P, Si) dans le milieu. Les éléments nutritifs peuvent potentiellement contrôler la croissance en la limitant s'ils ne sont pas présents en quantité suffisante. Ces limitations sont représentées à l'aide de fonctions de Monod (Eq. 9.2). La croissance maximale est elle-même pondérée par une limitation basée sur la disponibilité des précurseurs de croissance (Eq. 9.1) :

$$\mu = \mu_{max} \left( \frac{\frac{[S]}{[F]}}{\frac{[S]}{[F]} + K_S} \right) flimit \quad (9.1)$$

Avec  $\mu_{max}$  : Taux de croissance maximal, [h<sup>-1</sup>]

$\mu$  : Taux de croissance effectif, [h<sup>-1</sup>]

$K_S$  : Constante de demi-saturation vis-à-vis de la concentration en petits précurseurs [S], [mgC/L]

$flimit$  : Facteur de limitation de la croissance par les éléments nutritifs

Le facteur de limitation de la croissance par les éléments nutritifs est calculé de la manière suivante :

$$flimit = \min\left(\frac{[N]}{[N] + K_N}, \frac{[P]}{[P] + K_P}, \frac{[Si]}{[Si] + K_{Si}}\right) \quad (9.2)$$

Avec  $[N]$  et  $[P]$  : Concentrations en azote et phosphore minéraux utilisables par les algues, ( $[N] = [NO_3^-] + [NH_4^+]$ ) et ( $[P] = [PO_4^{3-}]$ )

$[Si]$  : Concentrations en silice dissoute utilisables pour les diatomées, ( $[Si] = [Si^{4+}]$ )

Les bilans des macromolécules (F) et des petites molécules sont :

$$\Delta F = \mu \times [F] \times dt \quad (10.1)$$

$$\Delta S = -\mu \times [F] \times dt \quad (10.2)$$

## 2.3. Respiration

La respiration comprend deux termes, l'un ( $R_m$ ) assurant la survie de la cellule (respiration de maintenance), l'autre ( $R_\mu$ ) correspondant à une dépense énergétique de croissance :

$$R_{tot} = R_m + R_\mu \mu \quad (11)$$

Avec  $R_m$  : Taux de respiration de maintenance de la survie de la cellule, [h<sup>-1</sup>]

$R_\mu$  : Taux de respiration liée à la dépense énergétique de la croissance  $\mu$ , [-]

La respiration consomme les petites molécules S (Fig. 1) suivant l'équation (12) :

$$\Delta S = -R_{tot} \times [F] \times dt \quad (12)$$

## 2.4. Excrétion

L'excrétion comprend également deux termes, le terme d'excrétion constant ( $E_{cst}$ ) et le terme en fonction du taux de photosynthèse ( $E_{phot}$ ),

$$E_{tot} = E_{cst} + E_{phot}P \quad (13)$$

Avec  $E_{cst}$  : Taux d'excrétion de base, [h<sup>-1</sup>]

$E_{phot}$  : Taux d'excrétion de base lié à la photosynthèse  $P$ , [-]

L'excrétion consomme aussi les petites molécules, S (Fig. 1) suivant l'équation 14. Le produit de l'excrétion est le substrat SODA assimilable par les bactéries hétérotrophes pour leur croissance (Wang et al., 2020).

$$\Delta S = -E_{tot} \times [F] \times dt \quad (14)$$

## 2.5. Synthèse et catabolise des produits de réserve

Le carbone fixé dans la cellule par photosynthèse correspond à des petits précurseurs devant être transformés, soit en protéines (Eq. 9.1), soit en produits de réserve (Eq. 15).

La synthèse des produits de réserve est également basée sur une fonction de Michaelis-Menten, dépendant du stock de précurseurs,

$$S_R = S_{R,max} \times \left( \frac{\frac{[S]}{[F]}}{\frac{[S]}{[F]} + K_S} \right) \quad (15)$$

Avec,  $S_{R,max}$  : Taux de synthèse maximal des produits de réserve, [h<sup>-1</sup>]

$S_R$  : Taux de synthèse effectif des produits de réserve, [h<sup>-1</sup>]

Les produits de réserve (les glucides et les lipides) sont susceptibles d'être catabolisés pour produire des précurseurs (S). Dans le modèle RIVE, une cinétique du premier ordre est utilisée pour représenter la catabolise ( $C_R$ ).

Le bilan des produits de réserve est donc :

$$\Delta R = (S_R \times [F] - C_R \times [R]) \times dt \quad (16)$$

Avec,  $C_R$  : Taux de catabolyse des produits de réserve, [h<sup>-1</sup>]

## 2.6. Mortalité

La mortalité des phytoplanctons est représentée sous la forme d'une cinétique du premier ordre. Le terme de mortalité du phytoplancton est appliqué aux macromolécules (F). Les organismes morts sont ensuite répartis dans les différents types de matière organique selon des proportions définies par l'utilisateur (Wang et al., 2020).

$$\Delta F = -K_{d,max} \times e^{-\frac{(T-T_{opt})^2}{\sigma^2}} \times [F] \times dt \quad (17)$$

Avec,  $K_{d,max}$  : Taux de mortalité maximal, [h<sup>-1</sup>]

## 2.7. Broutage (Zooplancton)

Le broutage des espèces phytoplanctoniques ne prend pas en compte les phénomènes de préférence et de sélection. Il est exprimé en fonction d'un terme de broutage maximal ( $B_{max}$ ) et d'une fonction de Michaelis-Menten dépendant de la biomasse phytoplanctonique consommable par les brouteurs :

$$B = B_{max} \times e^{-\frac{(T-T_{opt})^2}{\sigma^2}} \times \frac{([PHY] - [PHY]_0)}{([PHY] - [PHY]_0) + K_{PHY}} \quad (18.1)$$

Avec,  $B_{max}$  : Taux de broutage maximal, [h<sup>-1</sup>]

$[PHY]_0$  : Seuil de concentration en phytoplancton au-dessus duquel le broutage a lieu, [mgC/L]

$K_{PHY}$  : Constante de demi-saturation vis-à-vis de la concentration en phytoplancton, [mgC/L]

Le broutage et la croissance du zooplancton n'ont lieu qu'au-dessus d'un certain seuil de concentration en phytoplancton ( $[PHY]_0$ ). La matière broutée non employée pour la croissance est respirée.

## 2.8. Bilans de la biomasse phytoplanctonique et de l'oxygène dissous

D'après les processus décrits précédemment, un bilan de la biomasse phytoplanctonique peut être établi :

$$\Delta PHY = (P - R_{tot} - E_{tot}) \times [F] \times dt - (B + K_{d,max}) \times [PHY] \times dt \quad (19)$$

La variation de l'oxygène dissous intègre simultanément les respirations des différents organismes et l'activité photosynthétique. Les respirations des bactéries hétérotrophes et nitrifiantes ( $r_{O_2, BH}$  et  $r_{O_2, BN}$ ) sont décrites dans le rapport de Wang et al., (2020). Le coefficient de réaération ( $K_{rea}$ ) à l'interface air-eau (Thibodeaux et al., 1994 ; Vilmin et al., 2016 ; Wang et al., 2018) n'est pas détaillé ici.

$$\Delta[O_2] = \left( \tau \frac{\int P(z) dz}{h} - R_{tot} - r_{O_2, BH} - r_{O_2, BN} + K_{rea}([O_2]_{sat}(T) - [O_2]) \right) \times dt \quad (20)$$

Avec,  $\tau$  : Quotient photosynthétique, 1.25 molO<sub>2</sub>/molC par défaut

$h$  : Profondeur de la colonne d'eau, [m]

### 3. Paramètres relatifs aux phytoplanctons

Les significations et les valeurs des paramètres relatifs aux phytoplanctons sont détaillées ci-dessous (Tab. 1).

Tableau 1. Paramètres cinétiques relatifs aux phytoplanctons du modèle RIVE unifié.

Paramètre	Description	Unité	Valeur
$\alpha^*$	Capacité photosynthétique	$[h^{-1}(\mu E.m^{-2}.s^{-1})^{-1}]$	0.0012
$\beta^*$	Capacité de photoinhibition	$[h^{-1}(\mu E.m^{-2}.s^{-1})^{-1}]$	0
$\eta_{base}$	Coefficient d'extinction lumineuse pour l'eau pure	$[m^{-1}]$	0.2
$\eta_{chla}$	Coefficient d'extinction lumineuse dû à l'auto-ombrage	$[m^{-2}.\mu gchla]$	0.02
$\eta_{chla}$	Coefficient d'extinction lumineuse dû aux matières en suspension	$[m^{-2}.mg]$	0.042
$\mu_{max, DIA}^*$	Taux de croissance maximal pour diatomées	$[h^{-1}]$	0.05
$\mu_{max, GRA}^*$	Taux de croissance maximal pour chlorophycées	$[h^{-1}]$	0.05
$\mu_{max, CYA}^*$	Taux de croissance maximal pour cyanobactéries	$[h^{-1}]$	0.025
$B_{max}^*$	Taux de broutage maximal	$[h^{-1}]$	0.1
$[PHY]_0$	Seuil de concentration en phytoplancton au-dessus duquel le broutage a lieu	$[mgC/L]$	0.025
$C/chla$	Ratio carbone/chlorophylle <i>a</i>	$[mgC.\mu gchla^{-1}]$	0.035
$C_R$	Taux de catabolyse des produits de réserve R	$[h^{-1}]$	0.2
$E_{sct}$	Taux d'excrétion de base	$[h^{-1}]$	0.0006
$E_{phot}$	Taux d'excrétion de base lié à la photosynthèse	$[-]$	0.001
$K_S$	Constante de demi-saturation vis-à-vis des petites molécules S	$[-]$	0.06
$K_N$	Constante de demi-saturation vis-à-vis de l'azote	$[mgN/L]$	0.014
$K_{P, DIA}$	Constante de demi-saturation vis-à-vis du phosphore pour diatomées	$[mgP/L]$	0.0155
$K_{P, GRA}$	Constante de demi-saturation vis-à-vis du phosphore pour chlorophycées	$[mgP/L]$	0.062
$K_{P, CYA}$	Constante de demi-saturation vis-à-vis du phosphore pour cyanobactéries	$[mgP/L]$	0.062
$K_{d, DIA}$	Taux de mortalité maximal pour diatomées	$[h^{-1}]$	0.025
$K_{d, GRA}$	Taux de mortalité maximal pour chlorophycées	$[h^{-1}]$	0.035
$K_{d, CYA}$	Taux de mortalité maximal pour cyanobactéries	$[h^{-1}]$	0.006
$P_{max, DIA}^*$	Taux de photosynthèse maximal pour diatomées	$[h^{-1}]$	0.2
$P_{max, GRA}^*$	Taux de photosynthèse maximal pour chlorophycées	$[h^{-1}]$	0.25
$P_{max, CYA}^*$	Taux de photosynthèse maximal pour cyanobactéries	$[h^{-1}]$	0.1
$R_M$	Taux de respiration de maintenance de la survie de la cellule	$[h^{-1}]$	0.002
$R_\mu$	Taux de respiration liée à la dépense énergétique de la croissance	$[-]$	0.5

$S_{R,max,DIA}^*$	Taux de synthèse maximal des produits de réserve pour diatomées	[h <sup>-1</sup> ]	0.15
$S_{R,max,GRA}^*$	Taux de synthèse maximal des produits de réserve pour chlorophycées	[h <sup>-1</sup> ]	0.2
$S_{R,max,CYA}^*$	Taux de synthèse maximal des produits de réserve pour cyanobactéries	[h <sup>-1</sup> ]	0.075
$T_{opt,DIA}$	Température optimale pour la croissance des diatomées	[°C]	21
$\sigma_{DIA}$	Gamme de température pour la croissance des diatomées	[°C]	13
$T_{opt,GRA}$	Température optimale pour la croissance des chlorophycées	[°C]	37
$\sigma_{GRA}$	Gamme de température pour la croissance des chlorophycées	[°C]	15
$T_{opt,CYA}$	Température optimale pour la croissance des cyanobactéries	[°C]	37
$\sigma_{CYA}$	Gamme de température pour la croissance des cyanobactéries	[°C]	12

#### 4. Adaptation du calcul du taux de croissance

Le modèle pyRIVE est implémenté dans le programme pyNuts-RiverStrahler, qui se base sur une description lagrangienne des processus biogéochimiques dans une masse d'eau, dont l'intensité dépend en partie du temps de séjour dans cette même masse. Le temps de séjour est estimé pour chaque tronçon kilométrique. Un taux de croissance moyen journalier est donc calculé par pyRIVE pour chaque tronçon.

D'après les résultats de simulations présentées ici (Fig. 2 et Fig. 3), il apparaît que cette approche surestime le taux de croissance moyen (Fig. 2), présentant des écarts importants avec le modèle C-RIVE (Fig. 3). Pour cela, une version de pyRIVE, qui calcule le taux de croissance instantané à chaque pas de temps, est codée. Cette version de pyRIVE est utilisée ensuite pour comparer les processus relatifs aux producteurs primaires implémentés dans C-RIVE.

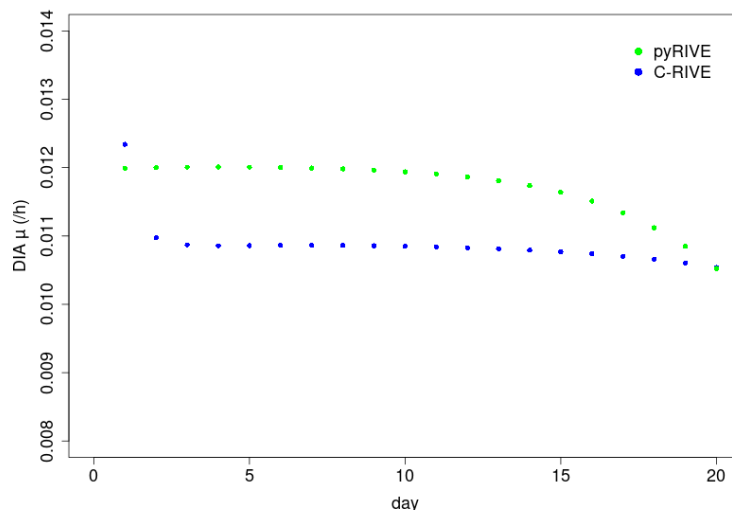


Figure 2. Taux de croissance moyen journalier simulé par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).



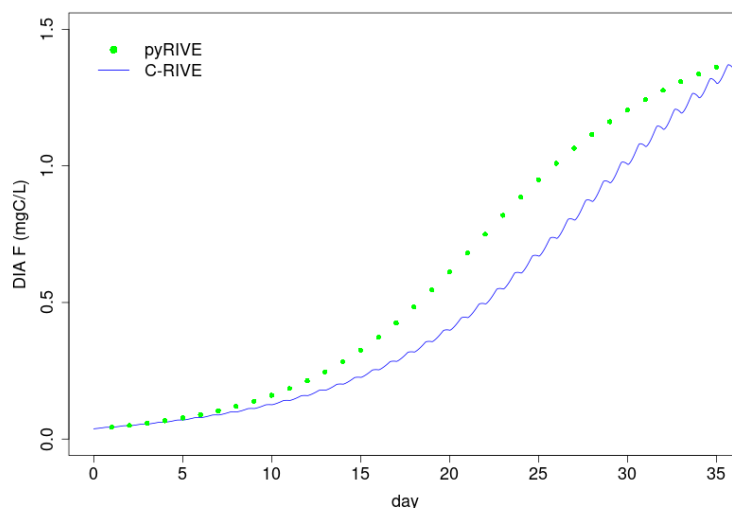


Figure 3. Concentrations des macromolécules F des diatomées simulées par pyRIVE avec taux de croissance moyen journalier (vert) et C-RIVE (bleu).

## 5. Simulation des producteurs primaires en conditions contrôlées

### 5.1. Cas bassine en conditions contrôlées

Les équations décrites précédemment ont été implémentées en Python (pyRIVE) et ANSI C (C-RIVE), et ont ensuite chacune évolué indépendamment au cours du temps. Afin de mieux explorer les deux codes, un cas théorique en conditions contrôlées, dit « bassine », a été construit (Wang et al., 2020). Ce cas bassine représente un réservoir d'une longueur de 10 000 mètres et d'une largeur de 2 985 mètres (Fig. 4). La hauteur d'eau dans le réservoir est fixée à 4,66 mètres. Un apport avec un débit de 230 m<sup>3</sup>/s correspondant à un temps de résidence de 7 jours est imposé à l'amont du réservoir. Afin d'assurer un volume d'eau constant dans le réservoir, un débit de sortie de 230 m<sup>3</sup>/s est également imposé.

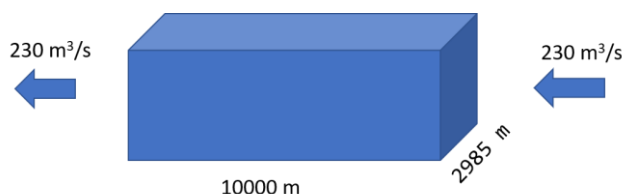


Figure 4. Cas bassine en conditions contrôlées.

Pour mieux comprendre les processus relatifs aux producteurs primaires, les simulations sont réalisées en conditions contrôlées. Les bactéries hétérotrophes et nitrifiantes ne sont pas simulées. Les concentrations des matières organiques sont initialisées à zéro. Trois communautés phytoplanctoniques (diatomées, chlorophycées, cyanobactéries) sont simulées. Les concentrations latérales des éléments nutritifs sont définies comme les concentrations des éléments nutritifs dans la bassine (Tab. 2). Les concentrations des phytoplanctons et des éléments nutritifs simulées par pyRIVE et C-RIVE sont comparées.

Tableau 2. Concentrations initiales des phytoplanctons et des éléments nutritifs.

DIA	GRA	CYA	O <sub>2</sub>	NH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub>	PO <sub>4</sub>	NO <sub>2</sub>	SiO <sub>2</sub>
mgC/L	mgC/L	mgC/L	mgO <sub>2</sub> /L	mgN/L	mgN/L	mgP/L	mgN/L	mgSi/L
0.0447	0.0539	0.0662	9.4458	0.2803	0.9409	0.0519	0.0164	3.0905

Tableau 3. Valeurs des paramètres utilisés.

$P_{\max,DIA}$	$P_{\max,GRA}$	$P_{\max,CYA}$	$K_{d,DIA}$	$K_{d,GRA}$	$K_{d,CYA}$
$h^{-1}$	$h^{-1}$	$h^{-1}$	$h^{-1}$	$h^{-1}$	$h^{-1}$
0.0375	0.0475	0.0185	0.0	0.0	0.0

Les valeurs des paramètres employés dans les deux codes sont identiques (Tab. 3). Afin de simuler un bloom d'algues, les taux de mortalité ( $K_{d,DIA}$ ,  $K_{d,GRA}$  et  $K_{d,CYA}$ ) sont fixés à zéro. La mortalité est modélisée avec une cinétique du premier ordre (Eq. 17) et validée pour les bactéries (Wang et al., 2020). Les valeurs de références sont utilisées pour les autres paramètres (Tab. 1). La température de l'eau est considérée constante avec une valeur de 17.05 °C.

Dans cette expérience, seuls les processus relatifs aux producteurs primaires dans la colonne d'eau sont comparés, et la couche sédimentaire n'est donc pas représentée. Le pas de temps de calcul est de 6 min pour les deux codes, en revanche la sortie du modèle est journalière pour py-RIVE et toutes les 6 minutes pour C-RIVE. Dans ce cas bassin, les éléments nutritifs sont très rapidement prélevés par les phytoplanctons pour leur croissance, et sont épuisés au bout de 40 jours. En conséquence, seules les concentrations simulées pour les 35 premiers jours de simulation sont illustrées ci-après.

## 5.2. Comparaison des simulations pyRIVE et C-RIVE

### 5.2.1. Matières en suspension minérales

Les concentrations en matières en suspension minérales sont présentées en premier (Fig. 5) afin de montrer l'effet de dilution. pyRIVE et C-RIVE simulent exactement les mêmes concentrations en matières en suspension minérales, ce qui montre que l'effet de dilution est représenté de manière similaire par les deux codes.

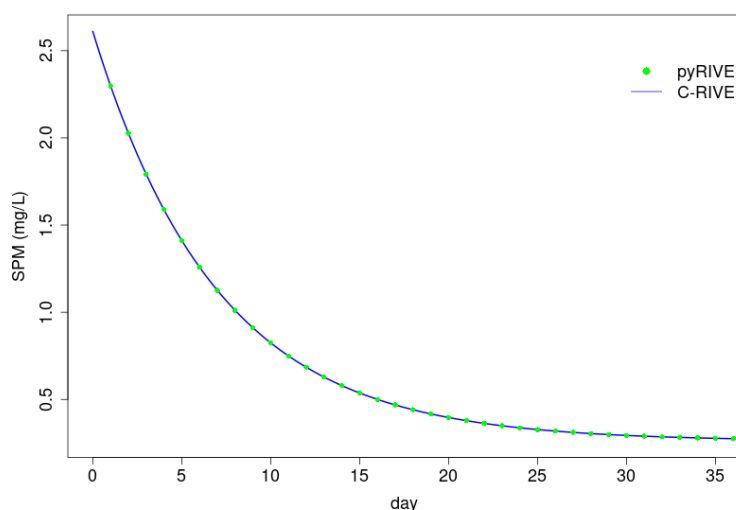


Figure 5. Concentrations en matières en suspension minérales simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

### 5.2.2. Oxygène dissous

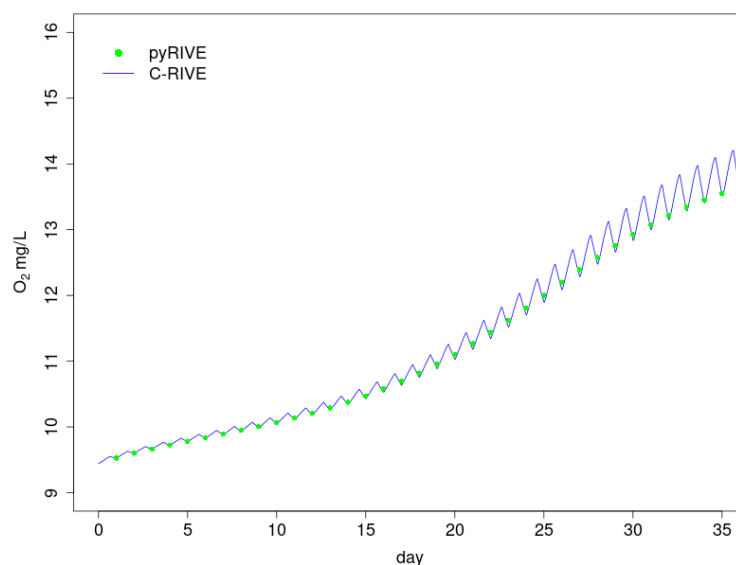


Figure 6. Concentrations en oxygène dissous simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

Les concentrations en oxygène dissous sont notamment influencées par la photosynthèse et la respiration des phytoplanctons dans ce cas bassin. Les concentrations en oxygène simulées par pyRIVE et C-RIVE sont très proches (Fig. 6) : les valeurs journalières tirées à minuit pour pyRIVE correspondent bien aux niveaux d'oxygène les plus bas représentés journalièrement par C-RIVE (Fig. 6), ce qui est en accord avec le démarrage de la photosynthèse (à 0 h dans ce cas bassin).

### 5.2.3. Diatomées

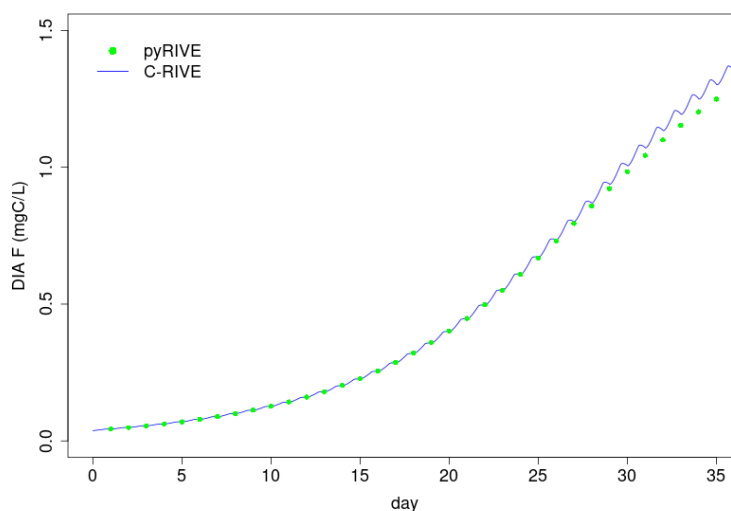


Figure 7. Concentrations des macromolécules F des diatomées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

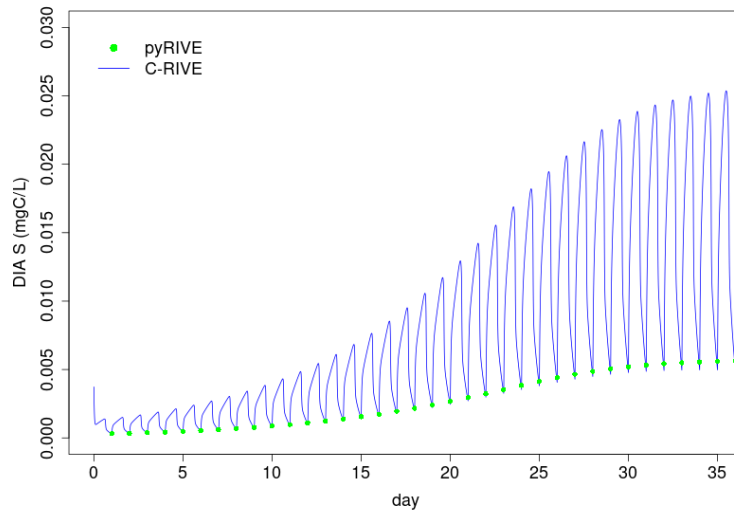


Figure 8. Concentrations des petits métabolites *S* des diatomées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

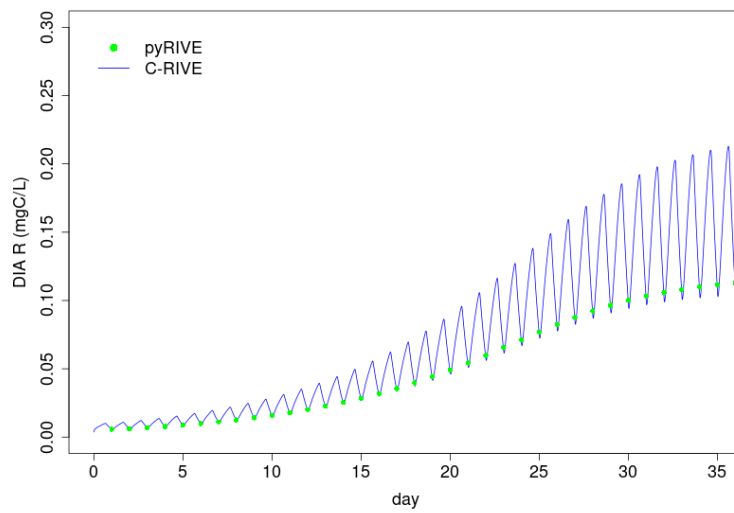


Figure 9. Concentrations des produits de réserve *R* des diatomées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

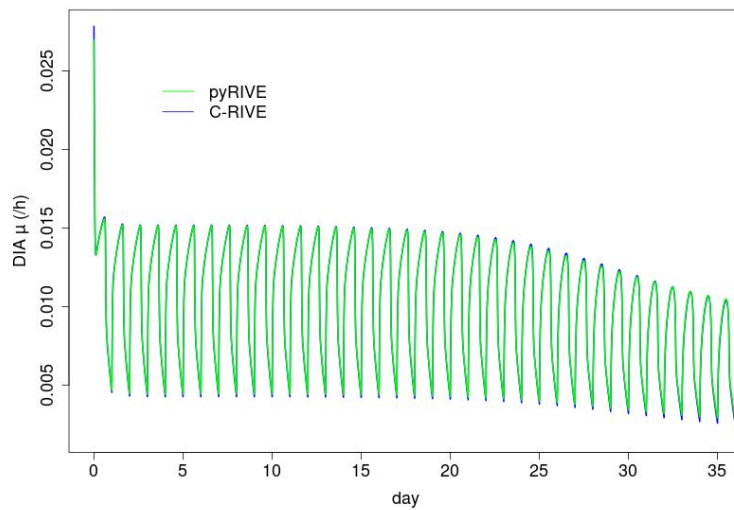


Figure 10. Taux de croissance effectif (Eq. 9.1) des diatomées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

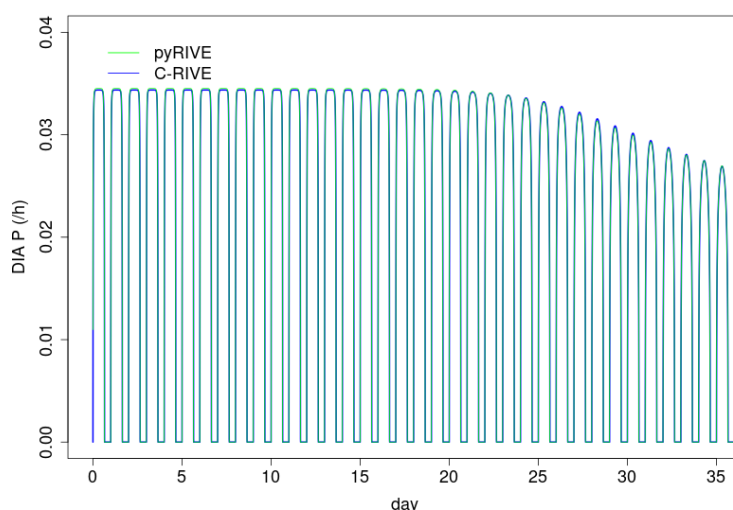


Figure 11. Taux de photosynthèse des diatomées moyenné sur la colonne d'eau ( $\frac{\int P(z)dz}{h}$ ) pour pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

Les concentrations des diatomées simulées par pyRIVE et C-RIVE sont également proches (Fig. 7, Fig. 8 et Fig. 9). Les variations nyctémérales des petits précurseurs (S) liées à la photosynthèse et des produits de réserve (R) sont aussi simulées de la même façon par les deux codes (Fig. 8 et Fig. 9). Les taux de croissance et les taux de photosynthèse sont cohérents entre les deux versions du code (Fig. 10 et Fig. 11). Cependant, on observe de petites différences ( $< 0.1$  mgC/L) entre les concentrations simulées par pyRIVE et C-RIVE au bout de 30 jours de simulation environ (Fig. 7). Ces différences sont très probablement liées aux processus de correction quand les nutriments (N, P, Si) deviennent limitants. Cela peut être confirmé par une diminution du taux de croissance et du taux de photosynthèse à partir du jour 20 (Fig. 10 et Fig. 11).

#### 5.2.4. Chlorophycées

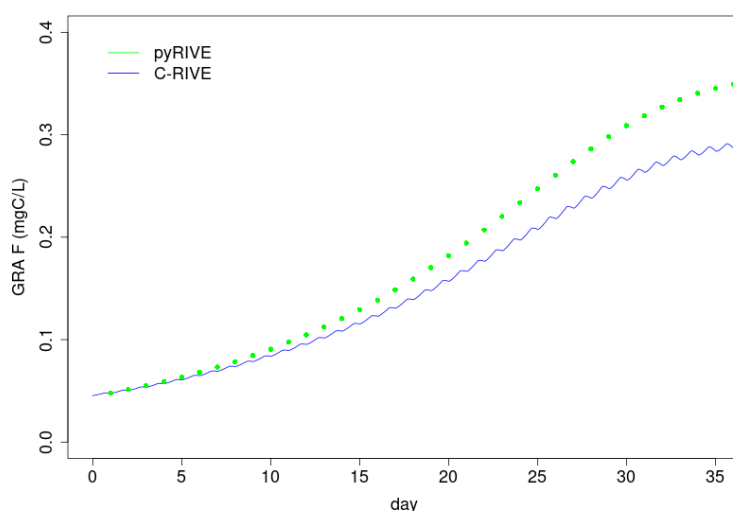


Figure 12. Concentrations des macromolécules F des chlorophycées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

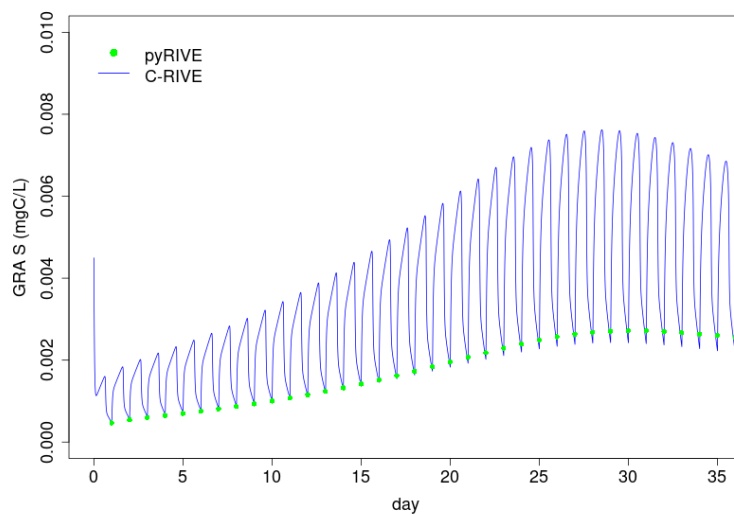


Figure 23. Concentrations des petits métabolites *S* des chlorophycées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

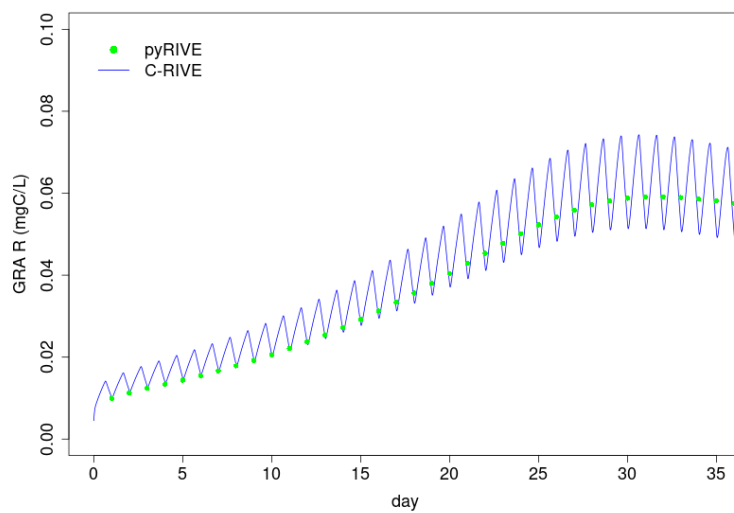


Figure 34. Concentrations des produits de réserve *R* des chlorophycées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

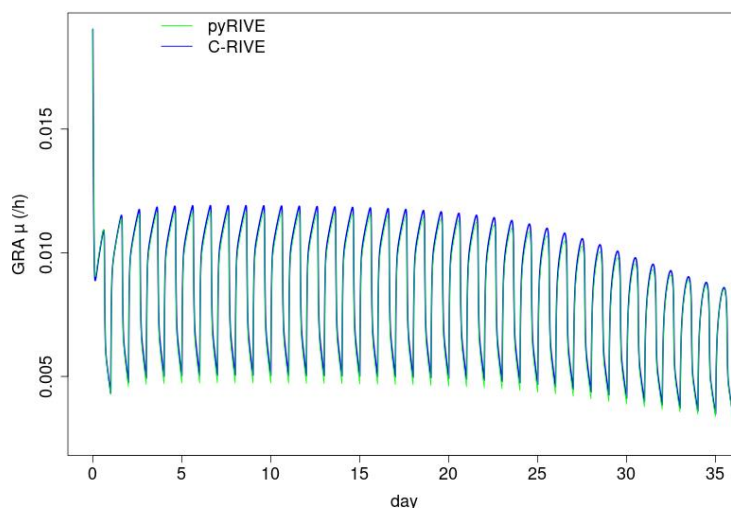


Figure 45. Taux de croissance effectif (Eq. 9.1) des chlorophycées simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

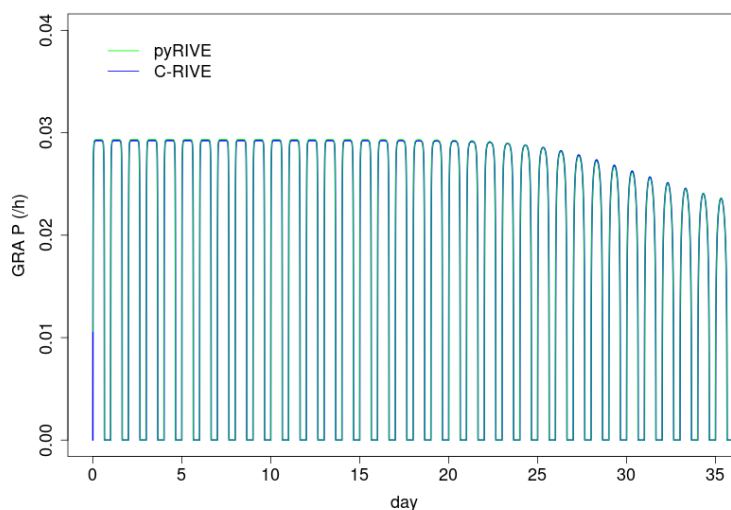


Figure 56. Taux de photosynthèse des chlorophycées moyenné sur la colonne d'eau ( $\frac{\int P(z)dz}{h}$ ) pour pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

Quant aux concentrations en chlorophycées, elles sont relativement cohérentes pour les 15 premiers jours (Fig. 12, Fig. 13 et Fig. 14). Des petites différences ( $< 0.1 \text{ mgC/L}$ ) entre les concentrations simulées par pyRIVE et C-RIVE sont également obtenues au bout de 15 jours de simulation (Fig. 12).

En revanche, les taux de croissance et les taux de photosynthèse simulés par les deux codes sont très proches pour les 35 premiers jours. Même si le taux de photosynthèse maximal des chlorophycées (GRA) utilisé est le plus grand parmi les trois types de phytoplanctons (Tab. 3), les taux de photosynthèse des chlorophycées calculés (Fig. 16) sont moins importants que ceux des diatomées (DIA) (Fig. 11). Cet écart est dû à l'effet de la température de l'eau ( $17,05^\circ\text{C}$ ) et à la température optimale  $T_{\text{opt}}$  ( $21^\circ\text{C}$  pour les diatomées vs.  $37^\circ\text{C}$  pour les chlorophycées). La photosynthèse des chlorophycées est ainsi limitée par la température de l'eau.

### 5.2.5. Cyanobactéries

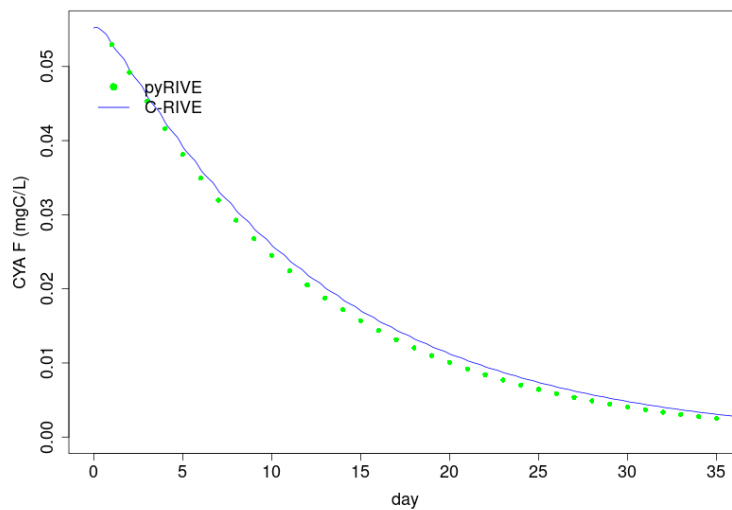


Figure 67. Concentrations des macromolécules F des cyanobactéries simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

Une décroissance des concentrations des cyanobactéries est simulée (Fig. 17), ce qui s'explique par une limitation de leur croissance par la température de l'eau. En effet, cette dernière est fixée à 17,05 °C, alors que les cyanobactéries présentent une croissance optimale autour de 37 °C (Tab. 3). Ces conditions conduisent cette espèce à présenter le plus faible taux réel de croissance issu d'un taux de photosynthèse maximal parmi les trois communautés simulées (Tab. 3), ce taux étant inférieur au taux de dilution. Les différences entre les concentrations simulées par pyRIVE et C-RIVE pour les cyanobactéries sont finalement très faibles (Fig. 17).

### 5.2.6. Éléments nutritifs

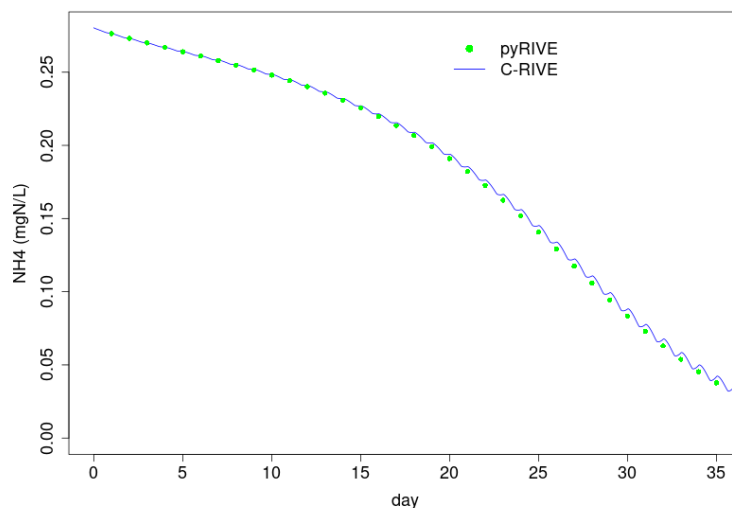


Figure 78. Concentrations en ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ) simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu)



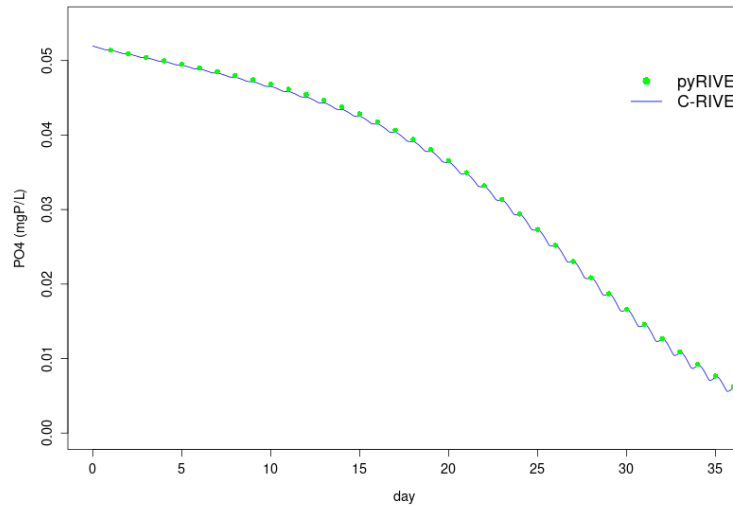


Figure 19. Concentrations en orthophosphate ( $\text{PO}_4^{3-}$ ) simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu)

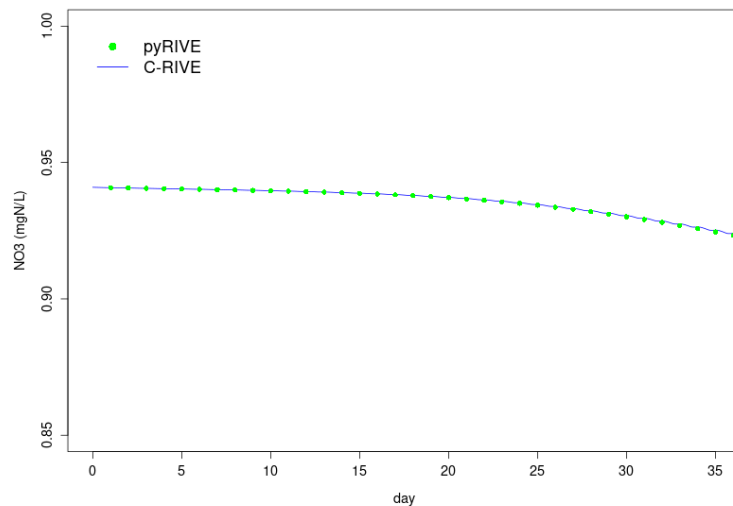


Figure 20. Concentrations en nitrate ( $\text{NO}_3^-$ ) simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu)

Les éléments nutritifs simulés par les deux codes sont cohérents (Fig. 18, Fig. 19 et Fig. 20). L'ammonium et les orthophosphates décroissent très rapidement, la diminution étant moins marquée pour les nitrates. Les croissances des phytoplanctons sont limitées par les orthophosphates disponibles dans la colonne d'eau (Tab. 1,  $K_p = 0.062 \text{ mgP/L}$ ).

### 5.2.7. Substrat SODA

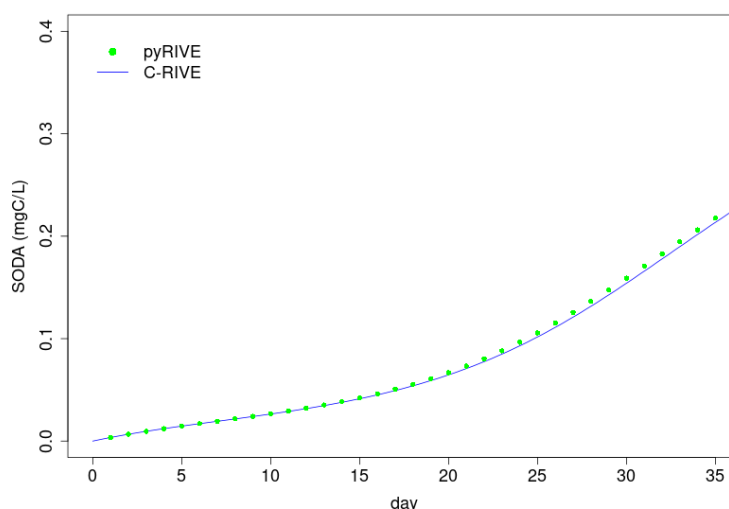


Figure 21. Concentrations en substrat SODA simulées par pyRIVE (vert) et C-RIVE (bleu).

Les concentrations initiales en substrat dans la bassine et les concentrations latérales sont fixées à zéro. La seule source de SODA est l'excrétion des communautés de phytoplancton (Eq. 13). Les concentrations en SODA simulées par les deux codes sont également très proches (Fig. 21), ce qui assure la conformité des processus d'excrétion et de photosynthèse implémentés dans pyRIVE et C-RIVE.

## Conclusion

Dans ce rapport, les dynamiques des producteurs primaires dans le modèle de biogéochimie aquatique RIVE unifié sont explorées. Les équations des processus relatifs aux producteurs primaires ainsi que les valeurs des paramètres sont d'abord décrites. Un cas test bassine en conditions contrôlées a été construit afin de comparer les dynamiques des producteurs primaires implémentées dans pyRIVE et C-RIVE. D'après les résultats, pyRIVE et C-RIVE reproduisent les concentrations des communautés phytoplanctoniques et des éléments nutritifs de manières similaires. Les équations décrites dans ce rapport peuvent donc servir à créer une conceptualisation unifiée du modèle de biogéochimie aquatique RIVE.

Afin d'atteindre ces performances comparables, un calcul séquentiel explicite des variables d'état à chaque pas de temps a été implémenté dans pyRIVE, conformément à la représentation phénoménologique de C-RIVE, en remplacement d'un calcul basé sur l'estimation du taux de croissance moyen journalier du phytoplancton. Ce calcul séquentiel sera utilisé pour estimer des concentrations moyennes des variables d'état par une série de simulations afin d'adapter pyRIVE dans le logiciel pyNuts-RiverStrahler. L'impact de cette modification algorithmique de pyRIVE sur les calculs à l'échelle du réseau hydrographique de la Seine par le logiciel pyNuts-RiverStrahler sera prochainement évalué.

## Bibliographie

- Billen, G., J. Garnier and P. Hanset (1994). Modelling phytoplankton development in whole drainage networks: the riverstrahler model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia*, 289: 119-137.
- Garnier, J., G. Billen, N. Sanchez and B. Leporcq (2000). Ecological Functioning of the Marne Reservoir (Upper Seine Basin, France). *Regulated Rivers-research & Management - REGUL RIVER* 16, 51-71.
- Lancelot, C., C. Veth, and C. Mathot (1991). Modelling ice-edge phytoplankton bloom in the Scotia-Weddell sea sector of the southern ocean during spring 1988. *Journal of Marine Systems* 2 (3-4), 333-346.
- Platt, T., K. Denman, and A. Jassby (1977). The Sea. Ideas and Observations on the Progress in the Study of the Seas. *Marine Modelling, Volume 6, Chapter Modelling the productivity of phytoplankton*, pp. 807-856.

- Thibodeaux, L., M. Poulin, and S. Even (1994). A model for enhanced aeration of streams by motor vessels with application to the Seine river. *Journal of Hazardous Materials* 37 (3), 459-473.
- Vilmin, L. (2014). Modélisation du fonctionnement biogéochimique de la seine de l'agglomération parisienne à l'estuaire à différences échelles temporelles. *Ph.D. thesis*. MINES ParisTech.
- Wang, S. (2019). Modélisation du métabolisme de la Seine par assimilation des données en continu. *Ph.D. thesis*. MINES ParisTech, PSL Université.
- Wang, S., N. Flipo and T. Romary, (2018). Time-dependent global sensitivity analysis of the C-RIVE biogeochemical model in contrasted hydrological and trophic contexts. *Water Research* 144, 341–355.
- Wang, S., N. Flipo and T. Romary, (2019). Oxygen data assimilation for estimating micro-organism communities' parameters in river systems. *Water Research* 165, 115021.
- Wang, S., N. Flipo and T. Romary, (2021). Particle filter for high frequency oxygen data assimilation in river systems. *Environmental Modelling & Software*, under revision.
- Wang, S., V. Thieu, N. Flipo, M. Silvestre, L. Weidenfeld and G. Billen (2020). Dégradation de la matière organique dans le modèle de biogéochimie aquatique RIVE : exploration des codes et expérimentation numérique en conditions contrôlées. *Rapport annuel du PIREN-Seine*.