

Dégradation de la matière organique dans le modèle de biogéochimie aquatique RIVE : exploration des codes et expérimentation numérique en conditions contrôlées

Shuaitao Wang^{1*}, Vincent Thieu¹, Nicolas Flipo², Marie Silvestre³, Lou Weidenfeld¹, Gilles Billen¹

¹ UMR 7619 METIS, Sorbonne Université, CNRS, EPHE, Paris

² MINES ParisTech, PSL Université, Centre de Géosciences, Fontainebleau

³ FR3020 FIRE, Sorbonne Université, CNRS, Paris

* shuaitao.wang@sorbonne-université.fr

Résumé

Le modèle aquatique RIVE co-existe au sein de plusieurs modèles développés au PIREN-Seine pour décrire le fonctionnement biogéochimique des réseaux hydrographiques (pyNuts-RiverStrahler), des milieux stagnants type barrage-réservoirs (BarMan) ou encore le fonctionnement hydro-biodynamique de la Seine depuis l'amont de Paris jusqu'à l'estuaire à Poses (ProSe-PA). Après 30 ans de recherche au sein du PIREN-Seine, l'évolution parallèle de ces codes, les adaptations numériques inhérentes aux langages de programmation et l'ajout de fonctionnalités posent aujourd'hui la question de leur comparabilité et compatibilité.

Durant la phase 8 du programme, un chantier d'unification des codes de RIVE vise à rassembler l'ensemble des développements récents et à renforcer la collaboration des équipes de recherche impliquées dans le développement du modèle. La représentation de la matière organique et sa dégradation dans les milieux aquatiques est une des premières actions dans cette démarche d'unification.

Des expériences numériques en conditions contrôlées sont réalisées afin de comparer la cinétique de la dégradation de la matière organique. Les modèles HSB et HB implémentés dans les deux codes peuvent relativement bien simuler la dynamique des microorganismes hétérotrophes associée à la dégradation de la matière organique en ajustant la valeur de la constante de demi-saturation du prélèvement de substrat dans C-RIVE. Afin de respecter la réalité du fonctionnement biologique des microorganismes ainsi que les valeurs des paramètres associés, il est indispensable de représenter les substrats monomériques assimilables directement par les bactéries hétérotrophes dans le modèle aquatique. Enfin, un modèle avec cinq groupes de matières organiques est testé, qui permet également de bien reproduire le profil du carbone organique dissous et la biomasse bactérienne observée par Servais et al., (1987).

Points clefs

- ✓ Accélération de la croissance des bactéries hétérotrophes pour le modèle HB de C-RIVE
- ✓ Résultats similaires pour les modèles HSB de py-RIVE et HB de C-RIVE en ajustant la valeur de constante de demi-saturation du prélèvement de substrat dans C-RIVE
- ✓ Nécessité de représenter les substrats monomériques dans le modèle aquatique et test d'un modèle HSB avec 5 groupes de matière organique

Abstract

The RIVE model co-exists within several models in the PIREN-Seine program to describe the biogeochemical functioning of hydrographic networks (pyNuts-RiverStrahler), dam-reservoirs (BarMan) or hydro-biodynamic functioning of the Seine river system from upstream of Paris to estuary at Poses (ProSe-PA). After 30 years of research, the parallel evolutions of these codes, the numerical adaptations inherent in programming languages and the addition of functionalities raise the question of their comparability and compatibility.

During phase 8 of the PIREN-Seine program, a project to unify these RIVE codes aims to bring together all recent developments, and to strengthen the collaboration of the research teams involved in the development of the model. In this context, the representation of the dynamics of organic matter and its degradation in aquatic environments is one of the first actions in this unification process.

Numerical experiments under controlled conditions are carried out in order to compare the kinetics of the degradation of organic matter. The HSB and HB models implemented in both codes can fairly well simulate the dynamics of heterotrophic microorganisms associated with degradation of organic matter by adjusting the value of the half-saturation constant of the substrate uptake in C-RIVE. In order to respect the biological nature of the microorganisms as well as the values of the associated parameters, it is essential to represent the monomeric substrates directly assimilable by heterotrophic bacteria in the biogeochemical aquatic model. Finally, a model with five organic matter pools is tested, which is also able to well reproduce the profile of the dissolved organic carbon and the bacterial biomass observed by Servais et al. (1987).

Key points

- ✓ Acceleration of heterotrophic bacteria growth for HB model of C-RIVE
- ✓ Similar results for the model HSB of py-RIVE and the HB of C-RIVE by adjusting the value of the half-saturation constant of the substrate uptake in C-RIVE
- ✓ Need for the representation of monomeric substrates, assimilable by heterotrophic microorganisms, in biogeochemical aquatic model and testing an HSB model with 5 organic matter pools

Introduction

La première étape du développement de RIVE a porté sur les mécanismes de dégradation de la matière organique (MO) par l'activité des bactéries hétérotrophes. Dans les années 1980, le développement de la microscopie à épifluorescence (Jones, 1974) ainsi que de puissantes méthodes pour mesurer l'activité des bactéries hétérotrophes (Fuhrman & Azam, 1980, Azam et al., 1983) ont permis de développer un modèle conceptuel de la dynamique de ces bactéries capable de simuler la dégradation de la MO dans les systèmes aquatiques et la consommation d'oxygène associée de façon plus réaliste que le modèle de Streeter et Phelps (1925) encore largement utilisé pour traiter les problèmes de pollution organique des rivières.

Le sous-modèle correspondant dans RIVE a été appelé « HSB », car il comporte 3 variables : H, les polymères de **H**aut poids moléculaire qui forment la majeure partie de la matière organique dissoute et particulaire, mais qui doivent être hydrolysés de manière exoenzymatique pour être accessibles aux microorganismes ; S, les petits **S**ubstrats monomères, directement accessibles à l'absorption microbienne ; B, la biomasse **B**actérienne qui se développe et respire sur les substrats organiques.

Depuis son développement initial (Billen et al., 1991), le modèle HSB a évolué au sein du modèle de biogéochimie aquatique RIVE. L'application de ce dernier à différents systèmes aquatiques (lacs, réservoirs,

réseaux hydrographiques, axe Seine) et l'implémentation dans différents langages de programmation (Qbasic, VisualBasic, C, Python) ont inévitablement amené le code initial de RIVE (incluant HSB) à évoluer dans des versions séparées et parfois difficilement comparables.

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 est ainsi une des premières actions dans cette démarche d'unification.

Dans ce rapport, une première partie propose une présentation simplifiée des principaux modules composant le modèle RIVE. La modélisation de la matière organique est ensuite présentée avec 3 approches : Streeter & Phelps, le modèle HSB initial, ainsi qu'une variante : le modèle HB. Les simulations de ces deux derniers modèles respectivement au sein des codes py-Rive et C-Rive, sont comparées dans une expérience numérique en conditions contrôlées (cas bassin). Cette première expérience est finalement complétée par une analyse des cinétiques et de leur paramétrisation à l'aide de mesures expérimentales de dégradation du carbone total et de biomasses bactériennes. Enfin, l'intérêt d'une nouvelle version de HSB, dite à 5 groupes de carbone est présentée et discutée.

1. Le Modèle RIVE pour la colonne d'eau

Le modèle RIVE est aujourd'hui implémenté dans différents codes de calcul s'appliquant à différents systèmes aquatiques :

- Les réseaux hydrographiques dans leur ensemble : pyNuts-RiverStrahler (code py-RIVE)
- La Seine depuis l'amont de Paris : Prose-PA (code C-RIVE)
- Les milieux stagnants tels que les lacs et réservoirs : BarMan (code py-RIVE)

Dans l'ensemble de ces applications, la modélisation RIVE inclut une représentation des processus biogéochimiques au sein de la colonne d'eau, mais également à l'interface avec le benthos. Nous limiterons ici la présentation et l'application de RIVE sans inclure les processus benthiques.

L'idée de base du modèle RIVE est celle de l'unicité des processus. Cette approche postule que les organismes aquatiques ont essentiellement la même réponse aux contraintes hydrologiques, chimiques ou physiques, quel que soit le secteur du continuum aquatique qu'ils occupent. Il est ainsi possible de définir un ensemble d'équations cinétiques génériques mettant en relation les activités biologiques (croissance, respiration, mortalité...) des microorganismes aquatiques avec leur environnement (par exemple, la température, les concentrations de substrats ou l'intensité lumineuse). La forme de ces relations et les valeurs des paramètres impliqués ont été déterminées par des expériences sur le terrain ou en laboratoire dans des conditions contrôlées. Ils sont ainsi fixés a priori, ne nécessitent pas (ou peu) de procédure de calage, et restent valables dans un large éventail de milieux aquatiques.

Le modèle RIVE peut être représenté sous forme de différents modules, interconnectés pour la plupart, parmi lesquels on retrouve le cycle des nutriments (N, P et Si), l'oxygène dissous, la dynamique des populations phytoplanctonique et zooplanctonique et enfin l'évolution de la matière organique en lien avec les bactéries hétérotrophes (module HSB). Les pools de matières organiques sont en partie alimentés par les populations planctoniques (mortalité et excrétion pour le phytoplancton) et échanges également avec les parties benthiques (par érosion et sédimentation). L'activité bactérienne va quant à elle permettre la respiration/minéralisation de la matière organique et l'apport de nutriments dans la colonne d'eau.

Au sein de RIVE, la dégradation de la matière organique (module HSB) a donc un rôle central, et les formalismes permettant de décrire cette dégradation sont présentés ci-après.

2. Exploration des codes et expérimentations numériques

2.1. Modèle Streeter & Phelps (1925) pour la dégradation de la MO

Historiquement, le premier modèle de dégradation de la MO en rivière est celui de Streeter & Phelps (1925) où la matière organique, mesurée globalement par la demande biologique en oxygène (BOD5), est considérée comme dégradée selon une cinétique de premier ordre.

$$\frac{dL}{dt} = k_1 \cdot L \quad (1)$$

où :

L : « charge organique », ou BOD5, mesurée en mgO_2/L

k_1 : constante de biodégradation en h^{-1} , à calibrer pour chaque type de matière organique, et éventuellement dépendante de la température.

Bien que datant de plus d'un siècle, ce modèle est toujours largement utilisé pour représenter la dynamique de la matière organique en milieu aquatique (Hellweger, 2015).

Pour rendre compte de l'existence simultanée de plusieurs classes de matière organique de biodégradabilité différente, un modèle multi-L peut être décrit où l'ensemble de la matière organique est supposée répartie entre plusieurs classes L_i , chacune caractérisée par sa propre constante de biodégradabilité k_i (Fig. 1).

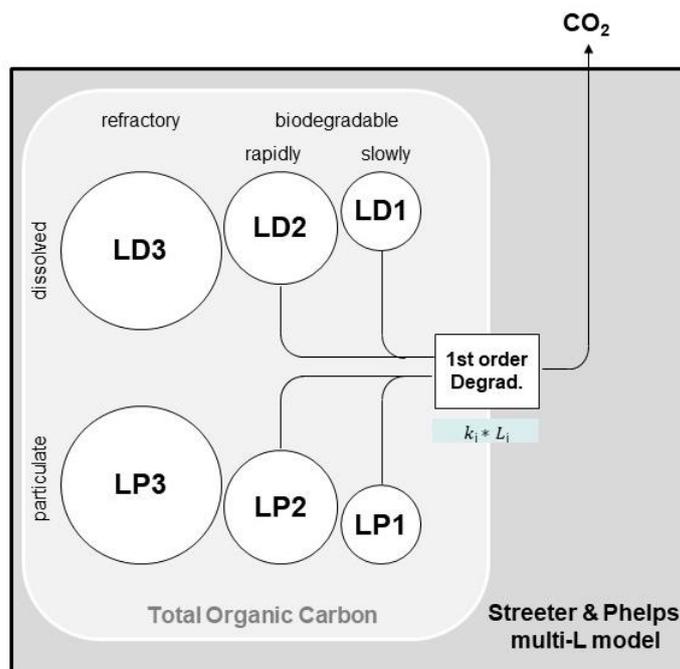


Figure 1. Représentation du modèle Streeter & Phelps multi-L (Hellweger, 2015).

Une limitation importante de ce type de représentation est que la nature microbiologique du processus de dégradation de la matière organique y est complètement occultée, n'étant prise en compte implicitement qu'à travers la valeur de la constante de biodégradabilité et sa dépendance à la température.

2.2. Modèle HSB pour la dégradation de la MO dans py-RIVE

Les travaux de biogéochimie microbienne des années 1980-1990 ont conduit à l'élucidation des mécanismes fins du processus de dégradation de la matière organique et de la dynamique microbienne associée (Billen et al., 1988,1989, 1990 ; Fontigny et al., 1987 ; Garnier et al, 1992a, b ; Servais et al, 1985,1987,1989 ; Somville & Billen, 1983 ; Vives-Rego et al, 1984). Ces travaux ont permis de proposer un schéma cinétique détaillé des processus (i) d'hydrolyse exoenzymatique de la matière organique complexe (polymérique, Eq. 6 et Eq. 7), (ii) de la croissance des populations de microorganismes hétérotrophes sur les substrats

monomériques produits (SODA) par cette hydrolyse (Eq. 2), (iii) de la mortalité des microorganismes (Eq. 2). La cinétique des processus identifiés et leurs facteurs de contrôle ont pu être mis en évidence et les paramètres qui la contrôlent mesurés expérimentalement dans un grand nombre de milieux aquatiques contrastés. Il a résulté de ces travaux un modèle générique de la dégradation de la matière organique en milieu aquatique, le modèle HSB (Billen et al., 1991), implémenté dans py-RIVE (Fig. 2). Les formalismes sont décrits ci-dessous (Eq. 2 - 7).

La matière organique est ainsi conceptuellement découpée pour chaque phase, dissoute et particulaire, en trois pôles correspondants chacun à une cinétique de biodégradabilité : (1) rapide à 5 jours, (2) moyenne à lente en 45 jours, (3) réfractaire.

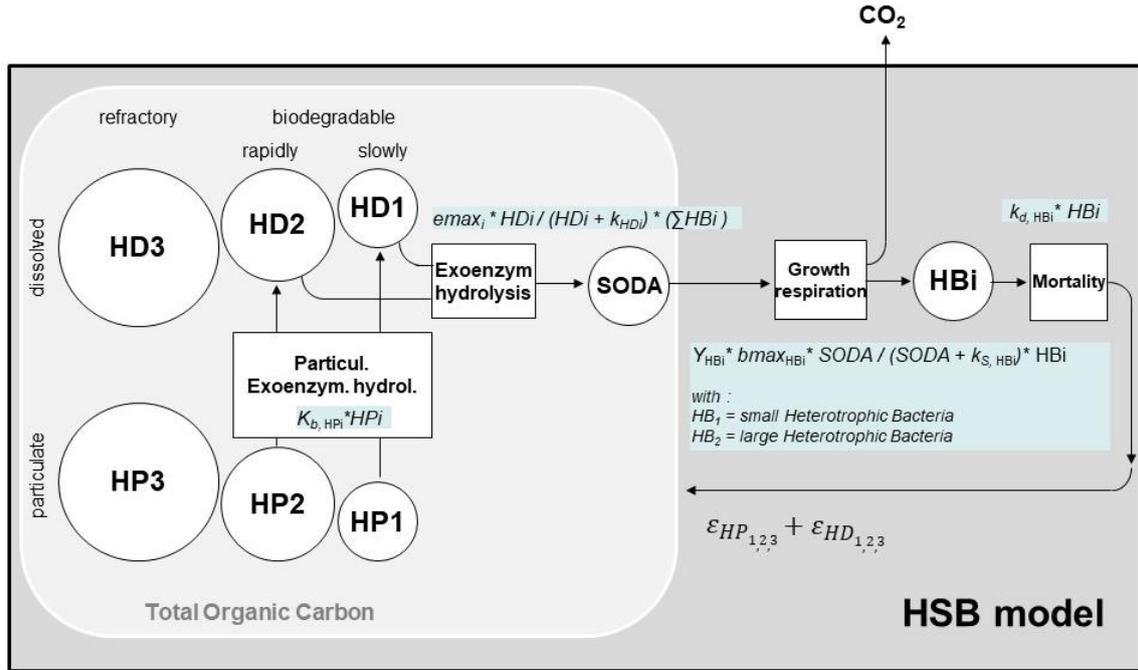


Figure 2. Le modèle HSB de la dégradation de la matière organique en milieu aquatique dans py-RIVE.

Deux populations de microorganismes hétérotrophes distinctes par leur taille (petites et grandes), sont prises en compte dans cette version ; les premières correspondent aux bactéries autochtones, les secondes à une population spécifique des stations d'épuration, apportées avec les rejets de ces dernières. L'excrétion et lyse du phytoplancton ne sont pas représentées dans la figure.

Les bactéries hétérotrophes (HB) :

$$\frac{dHB_i}{dt} = Y_{HB_i} * bmax_{HB_i} \left(\frac{SODA}{SODA + K_{s,HB_i}} \right) * HB_i - k_{d,HB_i} * HB_i - k_{sed,HB_i} * HB_i \quad (2)$$

où :

Y_{HB_i} : rendement de croissance des bactéries hétérotrophes HB_i , [-]

$bmax_{HB_i}$: taux maximal de prélèvement de SODA par les bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

K_{s,HB_i} : constante de demi-saturation du prélèvement de SODA pour HB_i , [mgC/L]

$k_{d,HB}$: taux de mortalité pour des bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

k_{sed,HB_i} : taux de sédimentation des bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}], $k_{sed,HB_i} = \frac{v_{sed,HB_i}}{depth}$

v_{sed,HB_i} : vitesse de sédimentation des bactéries hétérotrophes HB_i , [$m h^{-1}$]

$depth$: hauteur d'eau, [m]

Les substrats monomériques directement assimilables (SODA) :

$$\frac{dSODA}{dt} = \sum_{i=1}^2 hydr_{HD_i} - \sum uptake_{HB_i} + \sum excr_{PHY_i} \quad (3)$$

$$hydr_{HD_i} = emax_{HD_i} \left(\frac{HD_i}{HD_i + K_{HD_i}} \right) (\sum HB_i) \quad (4)$$

$$\text{uptake}_{\text{HB}_i} = \text{bmax}_{\text{HB}_i} \left(\frac{\text{SODA}}{\text{SODA} + K_{s,\text{HB}_i}} \right) * \text{HB}_i \quad (5)$$

où :

$\text{hydr}_{\text{HD}_i}$: hydrolyse des matières organiques dissoutes biodégradables (HD_i), [mgC L⁻¹ h⁻¹]

$\text{uptake}_{\text{HB}_i}$: prélèvement des substrats SODA par les bactéries HB_i, [mgC L⁻¹ h⁻¹]

$\text{excr}_{\text{PHY}_i}$: excrétion des différentes espèces de phytoplanctons PHY_i, 0 mgC L⁻¹ h⁻¹ dans cette étude

$\text{emax}_{\text{HD}_i}$: taux d'hydrolyse maximal des matières organiques dissoutes HD_i, [h⁻¹]

K_{HD_i} : constante de demi-saturation pour l'hydrolyse des matières organiques dissoutes HD_i, [mgC/L]

Les matières organiques polymériques biodégradables (dissoutes HD et particulaires HP) :

$$\frac{d\text{HD}_i}{dt} = -\text{hydr}_{\text{HD}_i} + (\sum k_{d,\text{HB}_i} * \text{HB}_i) * \varepsilon_{\text{HD}_i} + k_{\text{HP}_i} * \text{HP}_i \quad (6)$$

$$\frac{d\text{HP}_i}{dt} = -k_{\text{HP}_i} * \text{HP}_i + (\sum k_{d,\text{HB}_i} * \text{HB}_i) * \varepsilon_{\text{HP}_i} - k_{\text{sed},\text{HP}_i} * \text{HP}_i \quad (7)$$

où :

$\varepsilon_{\text{HD}_i}$: fraction de HD_i dans les produits des lyses des microorganismes, [-]

$\varepsilon_{\text{HP}_i}$: fraction de HP_i dans les produits des lyses des microorganismes, [-]

k_{HP_i} : taux d'hydrolyse des matières organiques particulaires HP_i, [h⁻¹]

$k_{\text{sed},\text{HP}_i}$: taux de sédimentation des matières organiques particulaires, HP_i, [h⁻¹], $k_{\text{sed},\text{HP}_i} = \frac{v_{\text{sed},\text{HP}_i}}{\text{depth}}$

$v_{\text{sed},\text{HP}_i}$: vitesse de sédimentation des matières organiques particulaires, HP_i, [m h⁻¹]

depth : hauteur d'eau, [m]

Ce modèle comporte un grand nombre de paramètres, dont les valeurs ont cependant pu être définies de manière assez générique (Tab. 1) : il n'y a donc pas de procédure de calage lors de l'application de ce modèle dans un milieu aquatique nouveau.

Tableau 1. Paramètres cinétiques du modèle HSB (py-RIVE)

Processus cinétique	Param	Signification	Small Bact	Large Bact	Unités
HP _i production by lysis	$\varepsilon_{\text{HP}1}$	HP ₁ fraction in lysis products		0.2	-
	$\varepsilon_{\text{HP}2}$	HP ₂ fraction in lysis products		0.2	-
	$\varepsilon_{\text{HP}3}$	HP ₃ fraction in lysis products		0.1	-
Enzym. HP _i hydrolysis	$k_{\text{HP}1}$	HP ₁ lysis rate		0.005	h ⁻¹
	$k_{\text{HP}2}$	HP ₂ lysis rate		0.00025	h ⁻¹
HP _i sedimentation	$V_{\text{sed}, \text{HP}_i}$	HP _i sinking rate		0.05	m h ⁻¹
HD _i production by lysis	$\varepsilon_{\text{HD}1}$	HD ₁ fraction in lysis pdcts		0.2	-
	$\varepsilon_{\text{HD}2}$	HD ₂ fraction in lysis pdcts		0.2	-
	$\varepsilon_{\text{HD}3}$	HD ₃ fraction in lysis pdcts		0.1	-
Enzym. HD _i hydrolysis	$\text{emax}_{\text{HD}1}$	max. rate of HD ₁ hydrolysis	0.75	0.75	h ⁻¹
	$\text{emax}_{\text{HD}2}$	max. rate of HD ₂ hydrolysis	0.25	0.25	h ⁻¹
	$K_{\text{HD}1}$	1/2 sat cst for HD ₁ hydrol.	0.25	0.25	mgC l ⁻¹
	$K_{\text{HD}2}$	1/2 sat cst for HD ₂ hydrol.	2.5	2.5	mgC l ⁻¹
Direct substrate uptake	$\text{bmax}_{\text{HB}_i}$	max. S uptake rate	0.16	0.6	h ⁻¹
	K_s	1/2 sat cst for S uptake	0.1	0.1	mgC l ⁻¹
Bact. growth	Y_{HB_i}	growth yield	0.25	0.25	-
Bact. mortality	k_{d,HB_i}	bact. lysis rate	0.02	0.05	h ⁻¹
Bact. sedimentation	$V_{\text{sed},\text{HB}_i}$	bacteria sinking rate	0	0.02	m h ⁻¹
Ammonification	cn	bact. C:N ratio	7		gC (gN) ⁻¹
PO ₄ production	cp	bact. C:P ratio	40		gC (gP) ⁻¹
Temperature dependency	T_{opt}	optimal temperature	20	22	°C
	d_{ti}	range of temperature	17	12	°C

2.3. Modèle HB pour la dégradation de la MO dans C-RIVE

Dans la représentation complète du modèle HSB, le groupe de petits substrats monomériques (SODA dans py-RIVE) est la variable qui contrôle la dynamique de croissance des microorganismes hétérotrophes. Ce groupe est alimenté par l'hydrolyse exoenzymatique de la matière organique dissoute (Eq. 3), et est consommé par le prélèvement des populations microbiennes (Eq. 2). Le temps de *turnover* de SODA est souvent très court, et sa taille souvent très faible par rapport au stock total mesurable de matière organique dissoute et totale.

Cette propriété peut être source de difficultés numériques lors de l'application du modèle, et peut nécessiter un pas de temps de calcul assez court pour ne pas générer d'instabilités numériques.

C'est la raison pour laquelle une nouvelle version du modèle a été conçue, où le groupe SODA est remplacé par le groupe HD1, et la dynamique des microorganismes hétérotrophes directement contrôlée par la matière organique la plus labile HD1 (Fig. 3). L'hydrolyse de HD2 produit ainsi les substrats monomériques HD1 dans cette version (Fig. 3 et Eq. 10). C'est le cas en particulier de la version utilisée dans C-RIVE, le modèle de processus sous-jacent au modèle ProSe-PA. La constante de demi-saturation du prélèvement de substrat (HD1), K_{s,HB_i} , est bien conservée dans cette version. Il est certain que la valeur de K_{s,HB_i} change par rapport à celle dans py-RIVE, puisque les concentrations en HD1 sont différentes de celles en SODA.

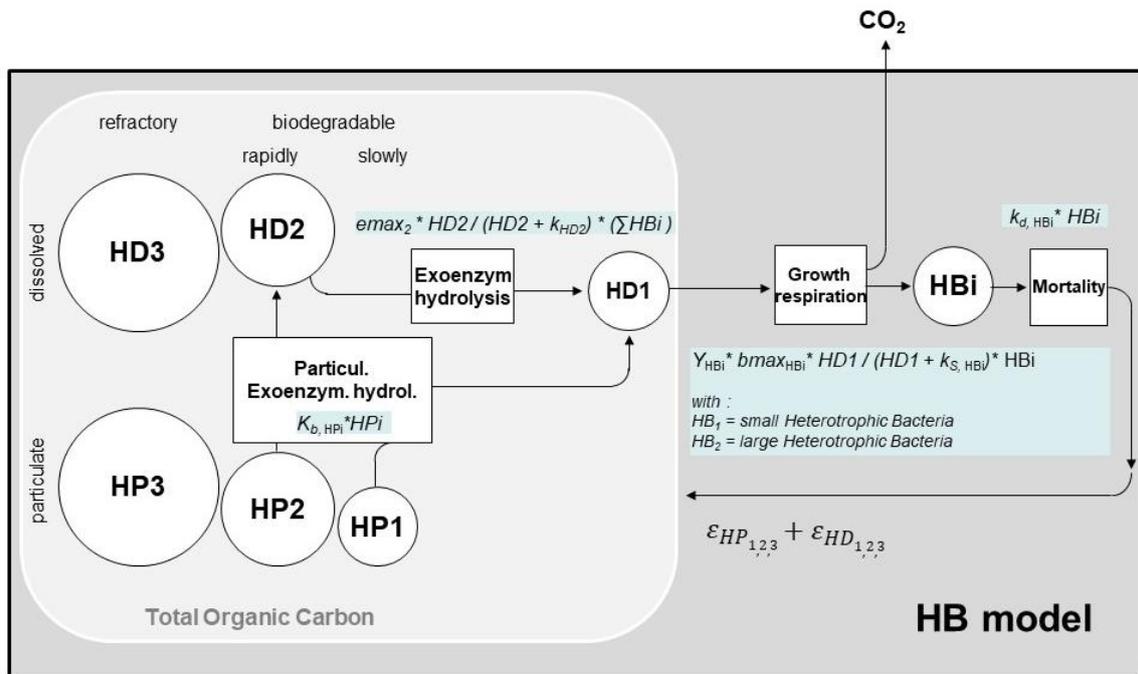


Figure 3. Le modèle HB de la dégradation de la matière organique en milieu aquatique dans C-RIVE. Le substrat monomérique (SODA) dans py-RIVE est remplacé par HD1. La constante de demi-saturation de prélèvement de HD1 (K_{s,HB_i}) est conservée. L'excrétion et la lyse du phytoplancton ne sont pas représentées dans la figure.

Les formalismes des bactéries hétérotrophes sont identiques à ceux de py-RIVE (Eq. 2), les substrats directement assimilables étant alors remplacé par la matière organique rapidement dissoute (HD1) (Eq. 8).

Les bactéries hétérotrophes (HB_i) :

$$\frac{dHB_i}{dt} = Y_{HB_i} * b_{max_{HB_i}} \left(\frac{HD1}{HD1 + K_{s,HB_i}} \right) * HB_i - k_{d,HB_i} * HB_i - k_{sed,HB_i} * HB_i \quad (8)$$

où :

Y_{HB_i} : rendement de croissance des bactéries hétérotrophes l' HB_i , [-]

$b_{max_{HB_i}}$: taux maximal de prélèvement de HD1 par les bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

K_{s,HB_i} : constante de demi-saturation du prélèvement de HD1 pour les bactéries hétérotrophes HB_i , [mgC/L]

k_{d,HB_i} : taux de mortalité des bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

k_{sed,HB_i} : taux de sédimentation des bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}], $k_{sed,HB_i} = \frac{v_{sed,HB_i}}{depth}$

v_{sed,HB_i} : vitesse de sédimentation des bactéries hétérotrophes HB_i , [$m h^{-1}$]

$depth$: hauteur d'eau, [m]

Pour des substrats et des hydrolyses des matières organiques polymériques sont décrits ci-dessous (Eq. 8 - 14).

Pour les substrats monomériques (HD1) :

$$\frac{dHD1}{dt} = hydr_{HD2} + hydr_{HP1} - \sum uptake_{HB_i} + \sum excr_{PHY_i} + (\sum k_{d,HB_i} * HB_i) * \varepsilon_{HD1} \quad (9)$$

$$hydr_{HD2} = emax_{HD2} \left(\frac{HD2}{HD2 + K_{HD2}} \right) (\sum HB_i) \quad (10)$$

$$hydr_{HP_i} = k_{HP_i} * HP_i \quad (11)$$

$$uptake_{HB_i} = bmax_{HB_i} \left(\frac{HD1}{HD1 + K_{s,HB_i}} \right) * HB_i \quad (12)$$

où :

$hydr_{HD2}$: hydrolyse de la MO dissoute lentement biodégradable (HD2), [$mgC L^{-1} h^{-1}$]

$hydr_{HP1}$: hydrolyse de $HP1$, [$mgC L^{-1} h^{-1}$]

$uptake_{HB_i}$: prélèvement des substrats HD1 par les bactéries HB_i [$mgC L^{-1} h^{-1}$]

$excr_{PHY_i}$: excrétion des différentes espèces de phytoplanctons PHY_i , $0 mgC L^{-1} h^{-1}$ dans cette étude

k_{d,HB_i} : taux de mortalité des bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

ε_{HD1} : fraction de HD1 dans les produits des lyses des microorganismes, [-]

$emax_{HD2}$: taux d'hydrolyse maximal de HD2, [h^{-1}]

K_{HD2} : constante de demi-saturation pour l'hydrolyse de HD2, [mgC/L]

k_{HP1} : taux d'hydrolyse de $HP1$

$bmax_{HB_i}$: taux maximal du prélèvement de HD1 par les bactéries hétérotrophes HB_i , [h^{-1}]

K_{s,HB_i} : constante de demi-saturation du prélèvement de HD1 pour les bactéries hétérotrophes HB_i , [mgC/L]

Les matières organiques polymériques biodégradables (dissoute HD2 et particulaire HP) :

$$\frac{dHD2}{dt} = -hydr_{HD2} + hydr_{HP2} + (\sum k_{d,HB_i} * HB_i) * \varepsilon_{HD2} \quad (13)$$

$$hydr_{HP2} = k_{HP2} * HP2 \quad (14)$$

$$\frac{dHP_i}{dt} = -hydr_{HP_i} + (\sum k_{d,HB_i} * HB_i) * \varepsilon_{HP_i} - k_{sed,HP_i} * HP_i \quad (15)$$

où :

$hydr_{HP2}$: hydrolyse de $HP2$, [$mgC L^{-1} h^{-1}$]

ε_{HD2} : fraction de HD2 dans les produits des lyses des microorganismes, [-]

ε_{HP_i} : fraction de HP_i dans les produits des lyses des microorganismes, [-]

k_{HP_i} : taux d'hydrolyse de l' HP_i

k_{sed,HP_i} : taux de sédimentation des matières organiques particulaires, HP_i [h^{-1}], $k_{sed,HP_i} = \frac{v_{sed,HP_i}}{depth}$

v_{sed,HP_i} : vitesse de sédimentation des matières organiques particulaires, HP_i , [$m h^{-1}$]

$depth$: hauteur d'eau, [m]

Tableau 2. Paramètres cinétiques du modèle HB (C-RIVE)

Processus cinétique	Param	Signification	Small Bact	Large Bact	Unités
HPi production by lysis	ϵ_{HP1}	HP ₁ fraction in lysis products		0.2	-
	ϵ_{HP2}	HP ₂ fraction in lysis products		0.2	-
	ϵ_{HP3}	HP ₃ fraction in lysis products		0.1	-
Enzym. HPi hydrolysis	k_{HP1}	HP ₁ lysis rate		0.005	h ⁻¹
	k_{HP2}	HP ₂ lysis rate		0.00025	h ⁻¹
HPi sedimentation	$V_{sed, HPi}$	HP _i sinking rate		0.05	m h ⁻¹
HDi production by lysis	ϵ_{HD1}	HD ₁ fraction in lysis pdcts		0.2	-
	ϵ_{HD2}	HD ₂ fraction in lysis pdcts		0.2	-
	ϵ_{HD3}	HD ₃ fraction in lysis pdcts		0.1	-
Enzym. HDi hydrolysis	e_{maxHD2}	max. rate of HD ₂ hydrolysis	0.25	0.25	h ⁻¹
	K_{HD2}	1/2 sat cst for HD ₂ hydrol.	2.5	2.5	mgC l ⁻¹
Direct substrate uptake	b_{maxHbi}	max. S uptake rate	0.16	0.6	h ⁻¹
	K_s	1/2 sat cst for S uptake	0.1	0.1	mgC l ⁻¹
Bact. growth	Y_{Hbi}	growth yield	0.25	0.25	-
Bact. mortality	$k_{d,Hbi}$	bact. lysis rate	0.02	0.05	h ⁻¹
Bact. sedimentation	$V_{sed,Hbi}$	bacteria sinking rate	0	0.02	m h ⁻¹
Ammonification	cn	bact. C:N ratio		7	gC (gN) ⁻¹
PO ₄ production	cp	bact. C:P ratio		40	gC (gP) ⁻¹
Temperature dependency	T_{opt}	optimal temperature	20	22	°C
	d_{ti}	range of temperature	17	12	°C

3. Simulations comparées de la cinétique de dégradation de la MO

3.1. Exploration numérique des codes en conditions contrôlées

3.1.1. Description du cas bassin

Afin de mieux explorer les deux codes py-RIVE et C-RIVE et de comparer les processus biogéochimiques représentés dans les deux codes, un cas bassin a été construit. Ce cas bassin 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 m³/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 m³/s est également imposé.

Tableau 3. Concentrations initiales des bactéries et des matières organiques biodégradables

Modèle	HB1	HB2	SODA	HD1	HD2	HP1	HP2
	mgC/L						
Py-RIVE	0.0052	0.0041	0.0359	0.0218	0.1744	0.0052	0.0215
C-RIVE	0.0052	0.0041	-	0.0577	0.1744	0.0052	0.0215

Les concentrations initiales et latérales (dans l'apport) des espèces biogéochimiques sont définies par les sorties d'une simulation de pyNuts-Riverstrahler (Tab. 3). Les données météorologiques (la température de l'eau et l'irradiance) sont calculées par les fonctions sigmoïdales implémentées dans les codes. Afin de simuler des conditions favorables à la croissance des microorganismes, les données météorologiques sont calculées pour le jour 151 de l'année 2010, soit le 1^{er} juin 2010. Cela donne une température de l'eau constante de 17,05 °C et une irradiance maximale de 1 238 $\mu\text{E}/\text{m}^2/\text{s}$. Ces conditions météorologiques sont maintenues constantes pour la suite de la simulation.

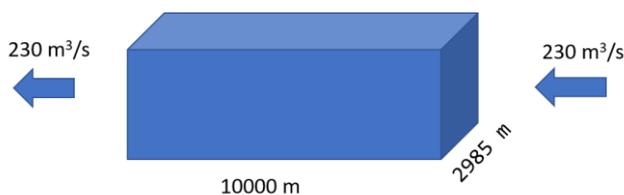


Figure 4. Cas bassin en conditions contrôlées.

On s'attend donc à l'établissement plus ou moins rapide d'un état stationnaire. La comparaison des deux modèles consiste ici à la fois dans la comparaison des deux états stationnaires atteints et dans la dynamique du système pour y parvenir.

Dans cette étude, on compare seulement les processus biogéochimiques dans la colonne d'eau. La couche sédimentaire ou la demande benthique ne sont ainsi pas représentées dans ce cas bassin. 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. Les valeurs des paramètres employées dans les deux codes sont identiques (Tab. 1 et Tab. 2).

3.1.2. Comparaison des simulations HSB (py-RIVE) vs. HB (C-RIVE)

Les concentrations en HB1 (*small heterotrophic bacteria*) et HB2 (*large heterotrophic bacteria*) simulées par les deux codes sont assez similaires (Fig. 5 et Fig. 6). Les deux modèles simulent une décroissance des bactéries hétérotrophes, ce qui signifie que le taux de mortalité est plus important que le taux de croissance pour les deux types de bactéries. La croissance des bactéries est limitée par les substrats (< 0.06 mgC/L, Eq. 2 et Eq. 8), puisque les constantes de demi-saturation du prélèvement de substrat (K_s) utilisées dans les deux codes ont la même valeur de 0.1 mgC/L (Tab. 1 et Tab 2). On observe que la biomasse bactérienne simulée par C-RIVE est légèrement supérieure à celle simulée par py-RIVE (Fig. 5 et Fig. 6). Ceci est lié à la concentration en HD1 qui est considérée comme les substrats monomériques dans C-RIVE. L'initialisation de HD1 dans C-RIVE se fait par la somme des concentrations en SODA et HD1 pour conserver la matière organique dissoute. La croissance des bactéries est ainsi moins limitée par les petits substrats (Tab. 3). C'est pourquoi l'on simule une décroissance de HD1 plus rapide que la décroissance de SODA dans py-RIVE pendant les premiers jours de simulation (Fig. 7).

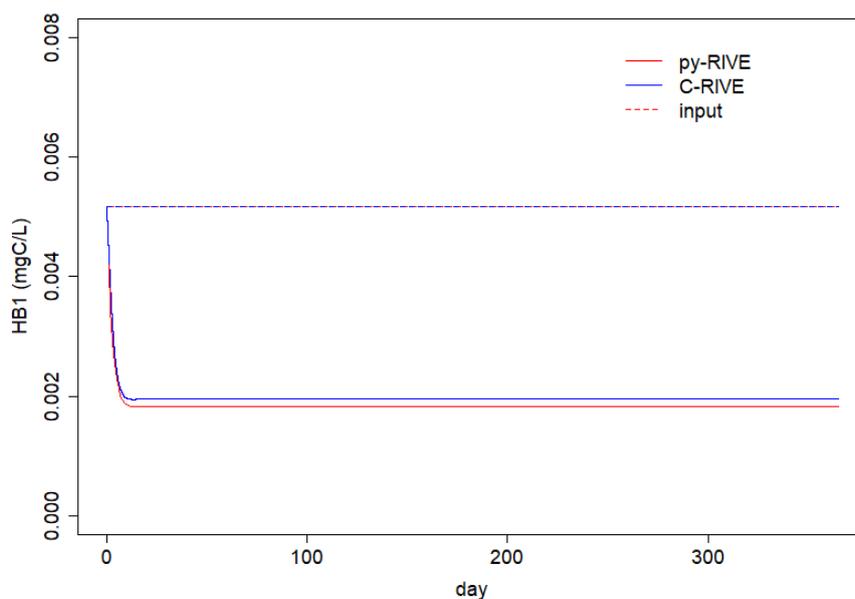


Figure 5. Simulation des concentrations en HB1 (*small heterotrophic bacteria*) pour le cas bassin par py-RIVE et C-RIVE. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées.

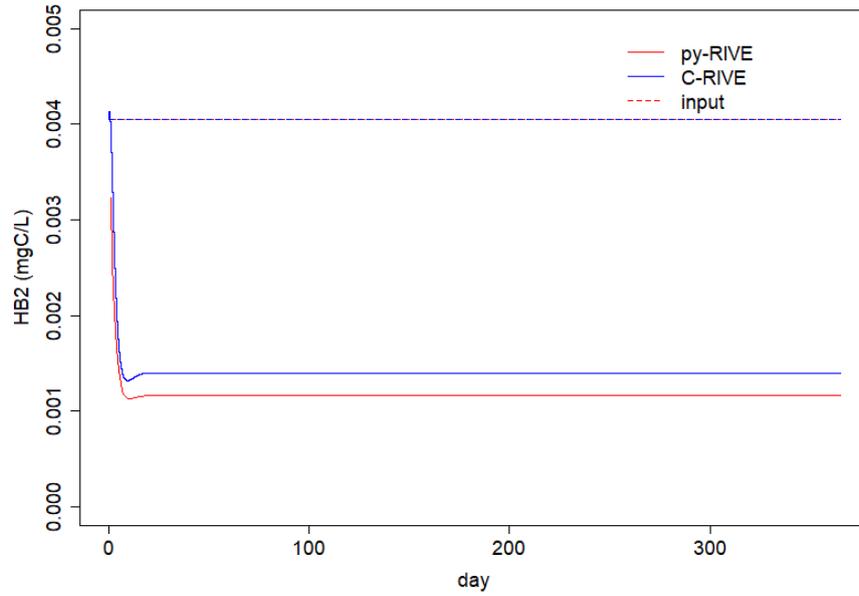


Figure 6. Simulation des concentrations en HB2 (large heterotrophic bacteria) pour le cas bassine par py-RIVE et C-RIVE. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées.

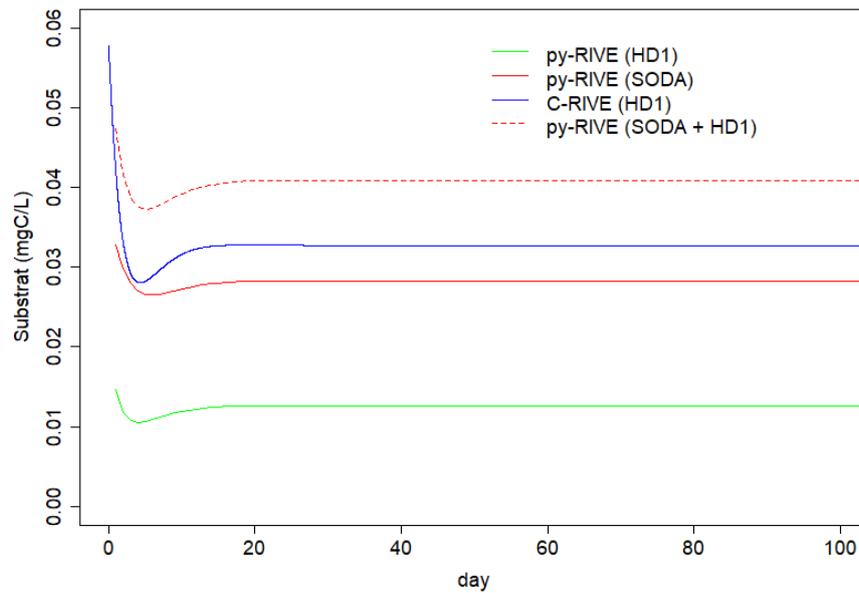


Figure 7. Simulation des substrats (SODA et HD1) pour le cas bassine par py-RIVE et C-RIVE. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées.

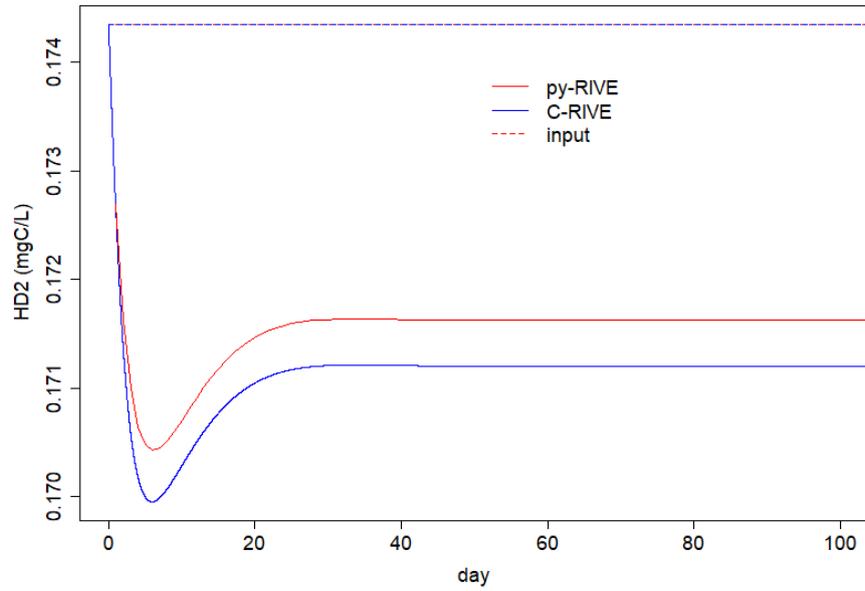


Figure 8. Simulation de HD2 pour le cas bassin par py-RIVE et C-RIVE. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées.

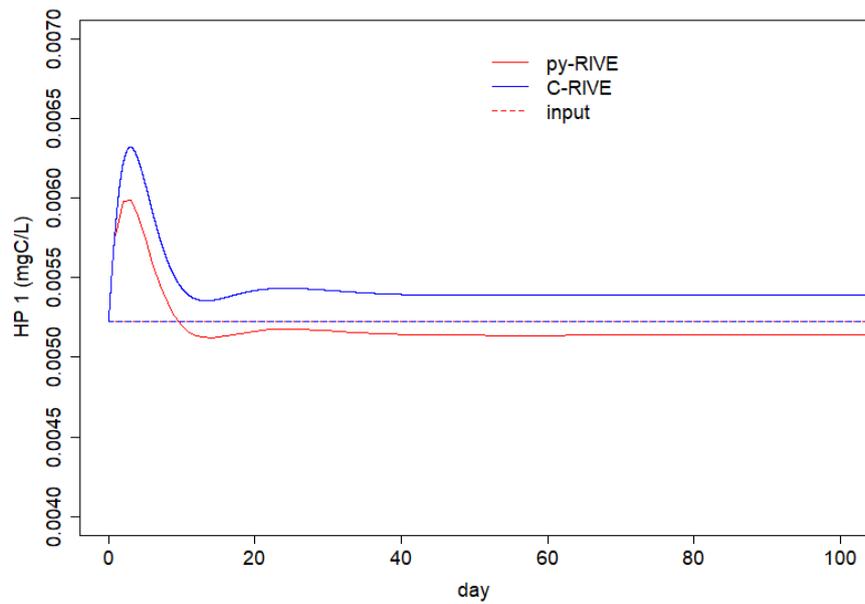


Figure 9. Simulation de HP1 pour le cas bassin par py-RIVE et C-RIVE. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées.

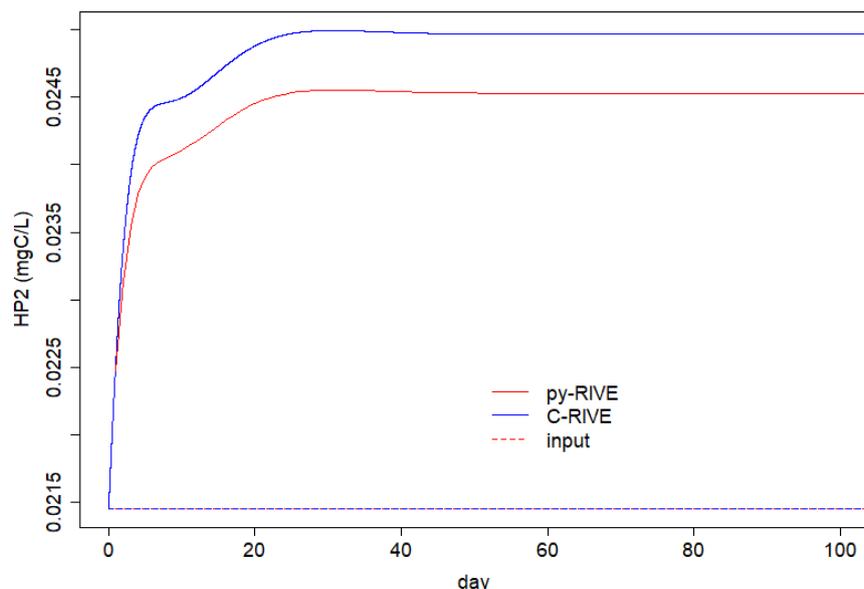


Figure 10. Simulation de HP2 pour le cas bassin par py-RIVE et C-RIVE). Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées, $K_s = 0,025 \text{ mgC/L}$.

Les résultats montrent également de faibles différences pour les simulations de HD2, HP1 et HP2 (Fig. 8, 9 et 10). Les tendances des concentrations simulées par les deux codes sont identiques. Toutefois, les concentrations simulées par C-RIVE sont légèrement supérieures à celles simulées par py-RIVE. Ces différences sont dues à la lyse des bactéries hétérotrophes, car la biomasse bactérienne simulée par C-RIVE est légèrement plus importante.

Malgré une légère différence observée, il semble que le remplacement de SODA par HD1 dans le modèle HB de C-RIVE accélère la croissance des microorganismes hétérotrophes en utilisant les mêmes valeurs de paramètres, notamment pour la constante de demi-saturation du prélèvement de substrat K_s . Il est toutefois nécessaire de déterminer s'il est possible d'obtenir les simulations similaires à celles de py-RIVE en calibrant la valeur de K_s dans C-RIVE. Pour cela, on simule une croissance des bactéries en la comparant avec des mesures expérimentales.

3.2. Approche expérimentale et confrontation aux mesures expérimentales

3.2.1. Mesures de la MO et de biomasses bactériennes

Il est clair que dans des états proches de l'état stationnaire, les deux modèles HSB et HB fournissent des simulations proches l'une de l'autre. Dans des situations de non-stationnarité, les deux modèles peuvent cependant différer largement, puisqu'ils ne représentent pas de la même façon la dynamique du système.

C'est l'ampleur de ces différences que nous cherchons à caractériser ici, à travers un exercice de simulation de cinétiques de dégradation de matière organique d'origines diverses.

Les données sont issues d'expériences classiques de détermination des fractions biodégradables de la matière organique dissoute d'échantillons environnementaux réalisées par Servais et al. (1987). Il s'agit de suivis du carbone organique dissous et de la biomasse bactérienne dans des échantillons filtrés et réinoculés d'eau de rivière (la Meuse) ou d'un effluent de station d'épuration.

3.2.2. Comparaison des cinétiques HSB vs. HB

Les résultats montrent que le modèle HSB implémenté dans py-RIVE permet de relativement bien simuler la dynamique des bactéries associées à la dégradation de la matière organique dissoute dans les deux échantillons (Fig. 11a et 11b). Les seuls changements de paramètres qui ont été nécessaires par rapport à ceux mentionnés dans le tableau 1 concernent :

- Le rendement de croissance des bactéries (Y) porté à 0,5 (contre 0,25 dans les paramètres par défaut de RIVE)
- Le taux de mortalité (k_d) ramené à $0,02 \text{ h}^{-1}$ (au lieu de $0,05 \text{ h}^{-1}$) pour les bactéries hétérotrophes allochtones.
- La constante de demi-saturation du prélèvement de SODA de $0,025 \text{ mgC/L}$ (au lieu $0,1 \text{ mgC/L}$).

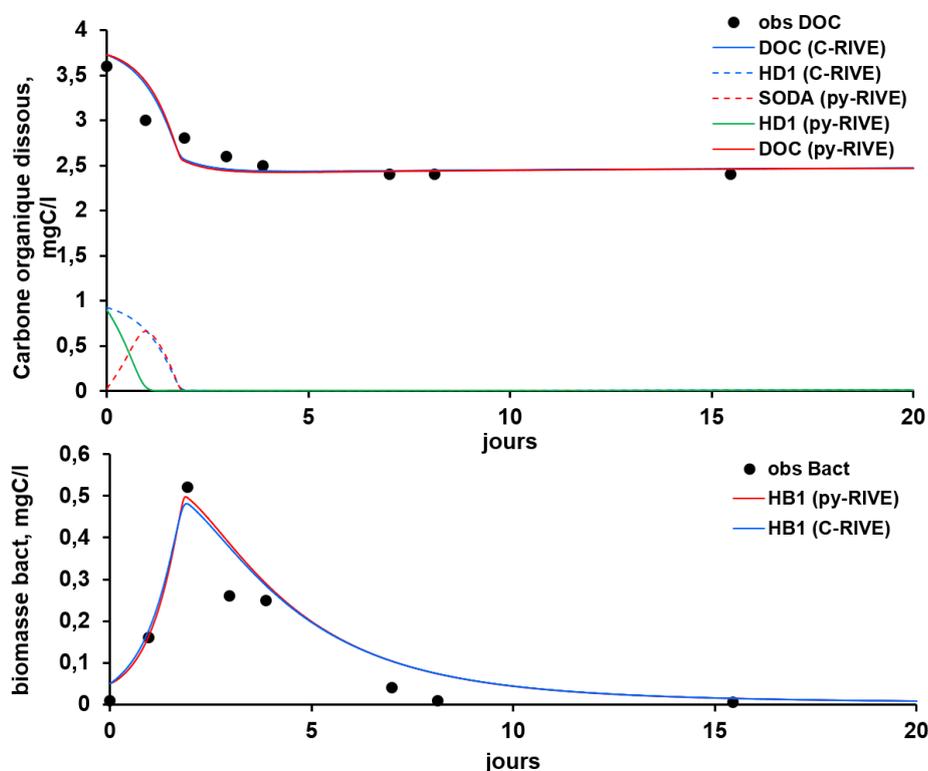


Figure 11a. Simulation par les modèles py-RIVE et C-RIVE de la dynamique des bactéries hétérotrophes dans un échantillon filtré et réinoculé d'eau de rivière (la Meuse, données de Servais et al. 1987).

$K_s = 0,025 \text{ mgC/L}$ pour py-RIVE et $K_s = 0,05 \text{ mgC/L}$ pour C-RIVE

Il apparaît également que le modèle HB implémenté dans C-RIVE accélère légèrement la croissance des bactéries hétérotrophes. Il est nécessaire d'ajuster la constante de demi-saturation du prélèvement de HD1 en fonction de la concentration en HD1 (0,05 mgC/L ou 0,4 mgC/L) pour bien simuler la dynamique des bactéries associées à la dégradation de la matière organique dissoute (Fig. 11a et 11b).

Une augmentation de K_s est nécessaire pour C-RIVE afin d'obtenir des simulations similaires à celles de py-RIVE. Cette augmentation de K_s ralentit le prélèvement du HD1 dans C-RIVE. Ce ralentissement est représenté par l'hydrolyse de HD1 vers SODA dans py-RIVE. Quand HD1 est totalement hydrolysé, les courbes de HD1 (C-RIVE) et de SODA (py-RIVE) se superposent (Fig. 11a et 11b).

En conclusion, les résultats montrent ainsi que le modèle HB a tendance à accélérer la croissance des microorganismes hétérotrophes. Les deux modèles peuvent produire des résultats similaires en jouant sur la constante de demi-saturation du prélèvement de HD1 pour C-RIVE, surtout dans un milieu riche en HD1. L'avantage de py-RIVE est que la valeur de K_s est assez générique (valable dans un grand nombre de situations) alors qu'elle nécessite un calage pour C-RIVE dans un milieu aquatique nouveau. L'ajustement de K_s dans le modèle HB est probablement une calibration artificielle, qui cache la valeur de K_s au sens biologique. La conservation du concept des substrats monomériques (SODA) respecte bien la biologie des microorganismes et devrait être conservée dans le modèle RIVE unifié afin d'en garantir la généricité.

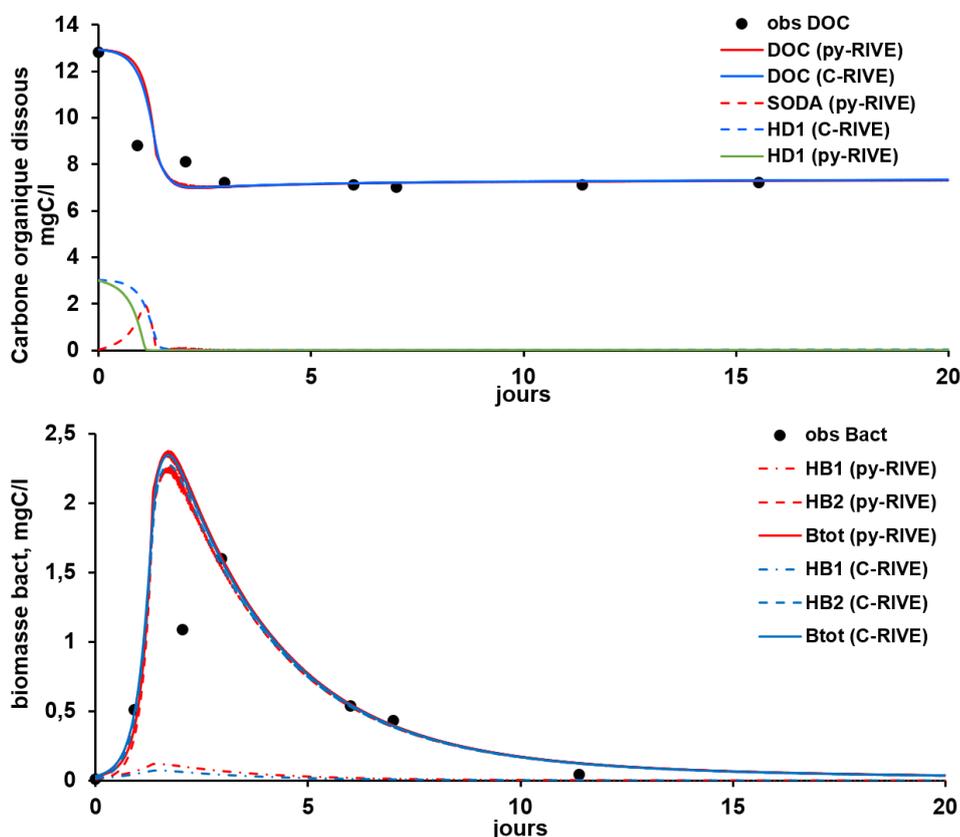


Figure 11b. Simulation par les modèles py-RIVE et C-RIVE de la dynamique des bactéries hétérotrophes dans un échantillon filtré et réinoculé d'eau usée (données de Servais et al. 1987). $K_s = 0,025$ mgC/L pour py-RIVE et $K_s = 0,4$ mgC/L pour C-RIVE

3.3. Test d'un modèle HSB avec 5 groupes matières organiques

Dans les expériences précédentes (Section 3.1 et Section 3.2), le modèle HSB proposé par Billen et al., (1991) compte 7 groupes de matières organiques (SODA, HD1, HD2, HD3, HP1, HP2, HP3). Le modèle fonctionne bien et simule explicitement la dégradation de la matière organique. En revanche, il est souvent difficile de déterminer les fractions des 7 groupes de matières organiques dans les sources diverses (rivière, station d'épuration, déversoir d'orage, etc.). Les données des groupes ne sont pas directement accessibles pour alimenter le modèle. La concentration initiale de SODA est souvent initialisée comme la valeur de K_s dans l'application de py-RIVE.

L'idée de cette section est de regrouper les groupes HD1 et HD2 en BHD (la matière organique dissoute biodégradable), les pools HP1 et les pools HP2 en BHP (la matière organique particulaire biodégradable), et d'envisager un modèle HSB avec seulement 5 groupes de matières organiques (SODA, BHD, RHD~HD3, BHP, RHP~HP3, Fig. 12). Ceci permet de réduire le nombre de paramètres ainsi que la surparamétrisation dans le modèle RIVE. Un modèle HSB avec 5 groupes de matières organiques est testé sur les données de Servais et al., (1987).

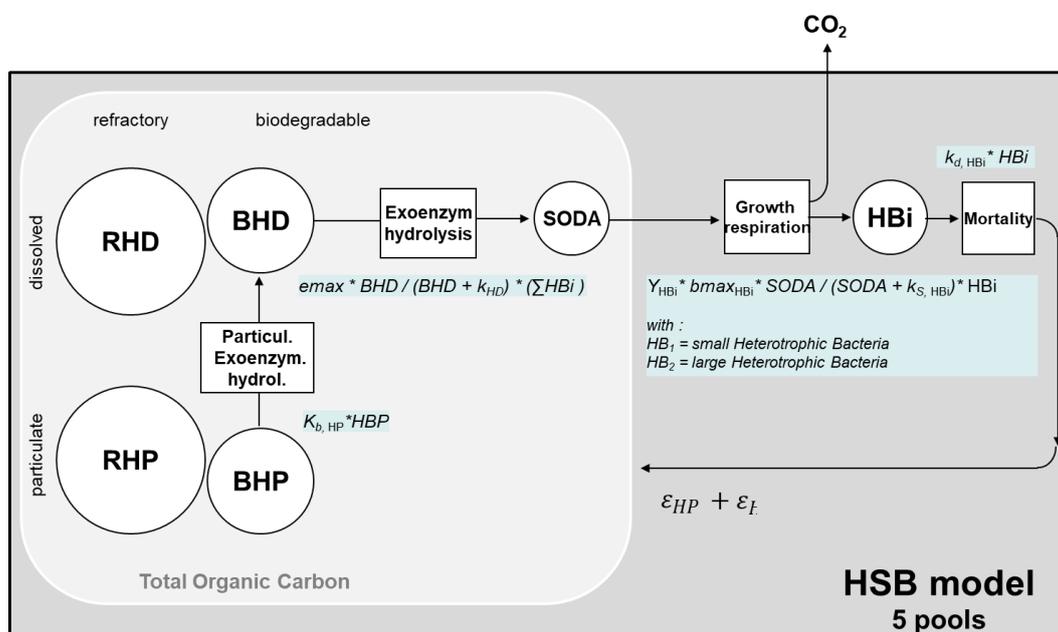


Figure 12. Le modèle HSB modifié, représentant la matière organique en 5 pools (groupes) et sa dégradation dans le milieu aquatique. L'excrétion et la lyse du phytoplancton ne sont pas représentées dans la figure.

La dynamique des bactéries hétérotrophes associées à la dégradation de la MO est bien reproduite avec le modèle HSB à 5 groupes de matières organiques (Fig. 13a et Fig. 13b). En revanche, il nécessite de jouer sur la concentration initiale des substrats monomériques (SODA) et la concentration en BHD et d'ajuster les valeurs des paramètres associées (Tab. 4 et Tab. 5) afin de bien simuler le profil du carbone organique dissous (DOC) et la biomasse bactérienne. Le résultat révèle l'importance de la détermination des fractions biodégradables de la matière organique dissoute (SODA, BHD), comme réalisé par Servais et al., (1987). Il est donc possible de simplifier le modèle HSB initial en 5 groupes de matières organiques.

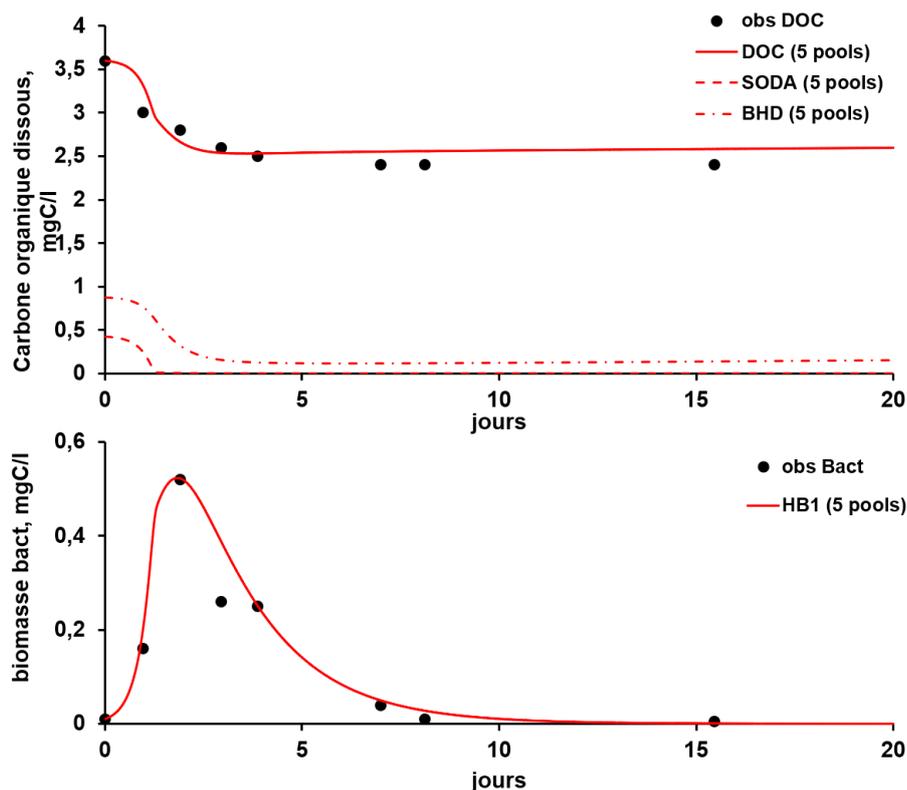


Figure 13a. Simulation par le modèle HSB avec 5 pools de MOs dans un échantillon filtré et réinoculé d'eau de rivière (données de Servais et al. 1987). $K_s = 0,025 \text{ mgC/L}$

Tableau 4. Paramètres cinétiques du modèle HSB avec 5 groupes de MO et les concentrations initiales en SODA et BHD pour l'eau de rivière

$e_{\text{max}_{\text{BHD}}}$	K_{BHD}	k_{BHP}	$b_{\text{max}_{\text{SB}}}$	Y_{SB}	$k_{\text{d}_{\text{SB}}}$	SODA	BHD
h^{-1}	mgC/L	h^{-1}	h^{-1}	$[-]$	h^{-1}	mgC/L	mgC/L
0,375	2,75	0,00025	0,22	0,8	0,034	0,425	0,875

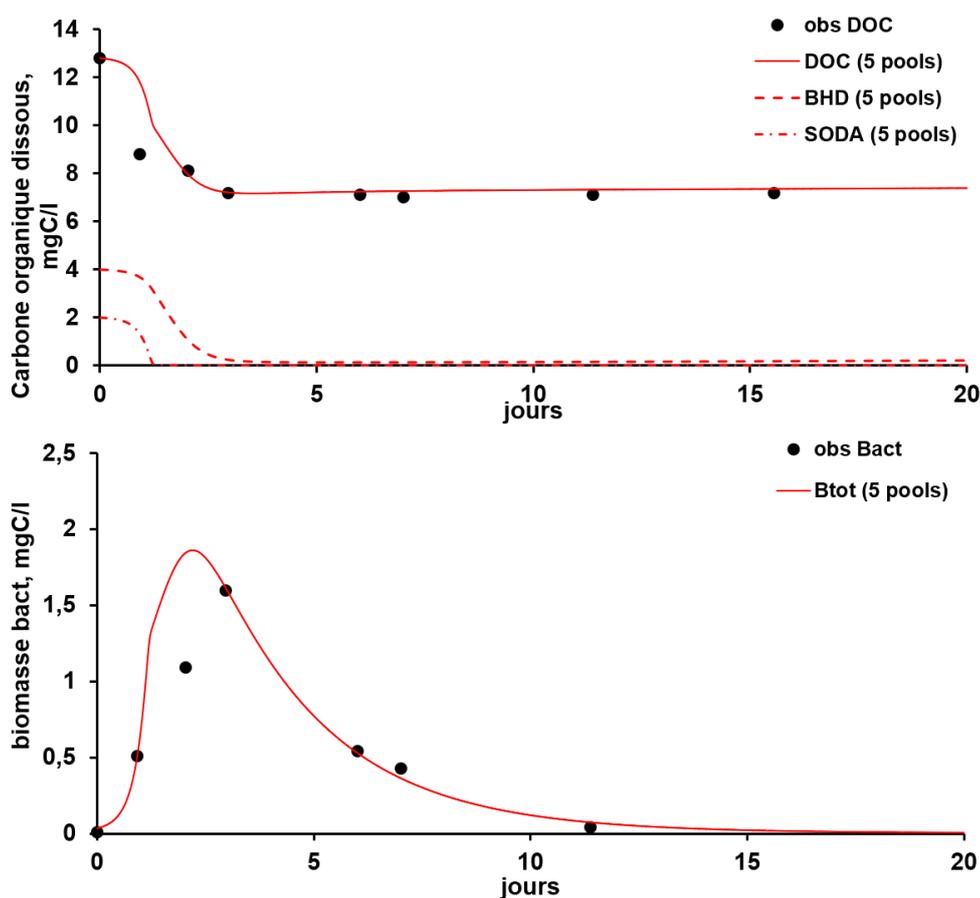


Figure 13b. Simulation par le modèle HSB avec 5 pools de MOs dans un échantillon filtré et réinoculé d'eau usée (données de Servais et al. 1987). Btot : la biomasse bactérienne totale. $K_s = 0,1 \text{ mgC/L}$

Tableau 5. Paramètres cinétiques du modèle HSB avec 5 groupes MOs et les concentrations initiales en SODA et BHD pour l'eau usée

$e_{\text{max}_{\text{BHD}}}$	K_{BHD}	k_{BHP}	$b_{\text{max}_{\text{LB}}}$	Y_{LB}	$k_{\text{d}_{\text{LB}}}$	SODA	BHD
h^{-1}	mgC/L	h^{-1}	h^{-1}	[-]	h^{-1}	mgC/L	mgC/L
0,18	2,75	0,00025	0,4	0,5	0,02	2,0	4,0

Conclusion

Le cinétique de la dégradation de la matière organique représentée dans les modèles HSB de py-RIVE et HB de C-RIVE a été explorée et comparée aux résultats des expériences en conditions contrôlées. Le modèle HSB de py-RIVE a été développé par Billen et al., (1991) avec 7 groupes de matières organiques qui décrivent bien les matières organiques biodégradables/réfractaires, monomériques/polymériques. La version HB dans C-RIVE regroupe les substrats monomériques (SODA pour py-RIVE) et HD1 et considère que le groupe HD1 (DOM1) regroupé est composé de monomères assimilables directement par les microorganismes hétérotrophes.

Les deux modèles peuvent assez bien simuler la dynamique des bactéries hétérotrophes associées à la dégradation de la matière organique. Le modèle HB de C-RIVE a tendance à accélérer la croissance des bactéries hétérotrophes. Il est donc nécessaire d'ajuster la constante de demi-saturation du prélèvement de substrats (K_s) dans C-RIVE pour obtenir des résultats similaires à ceux simulés par py-RIVE. Afin de garantir une genericité biologique du code RIVE unifié, il est recommandé de conserver le concept de substrat monomérique. La paramétrisation de ce modèle semble de plus robuste et éprouvée.

La simulation d'expériences de laboratoire relatives à la dégradation de la matière organique montre l'importance de la détermination des fractions des matières organiques (7 groupes) dans le modèle HSB. En revanche, les fractions des matières organiques sont peu accessibles. Pour réduire le nombre des fractions à déterminer, un modèle HSB avec 5 groupes de matière organique est testé sur les mêmes données. Le modèle HSB avec 5 groupes de matière organique permet aussi de bien simuler le profil de la matière organique dissoute que la biomasse bactérienne. Il est donc possible de transformer le modèle HSB initial avec seulement 5 groupes de matière organique. On distingue ainsi les substrats monomériques (SODA), la matière organique biodégradable dissoute (BHD) et particulaire (BHP), la matière organique réfractaire dissoute (RHD) et particulaire (RHP).

La représentation des activités phytoplanctoniques ainsi que la dynamique des nutriments constituent les prochaines étapes dans ce chantier d'unification de RIVE.

Bibliographie

Azam, F., Fenchel, T., Field, J., Gray, J., Meyer-Reil, L., & Thingstad, F. (1983). The Ecological Role of Water-Column Microbes in the Sea. *Marine Ecology Progress Series*, 10(3), 257-263. <http://www.jstor.org/stable/24814647>

Billen, G., Servais, P. and Fontigny, A. (1988). Growth and mortality in bacterial populations dynamics of aquatic environments. *Arch. Hydrobiol. Beih. Ergebn. Limnol.*, 31: 173-183.

Billen, G. & P. Servais, 1989. Modélisation des processus de dégradation bactérienne de la matière organique en milieu aquatique. In : *Micro-organismes dans les écosystèmes océaniques*. Bianchi et coll. Masson. p. 219-245.

Billen, G., P. Servais and S. Becquevort, 1990. Dynamics of bacterioplankton in oligotrophic and eutrophic aquatic environments: Bottom-up or top-down control? *Hydrobiologia*, 207: 37-42.

Billen, G., 1991. Protein degradation in Aquatic Environments. In : *Microbial Enzyme in Aquatic Environments*. R. Chrost, ed., Springer Verlag, Berlin, pp. 123-143.

Fontigny, A., Billen, G., Vives-Rego, J., 1987. Some kinetic characteristics of exoproteolytic activity in coastal seawater. *Est. Coast. Shelf Sci.* 25 : 127-133.

Garnier, J., Servais, P. & Billen, G., 1992. Dynamics of bacterioplankton in the river Seine (France) : Impact of the Parisian effluents. *Can. Journ. Microbiol.*, 38 : 56-64.

Garnier, J., Billen, G. & Servais, P., 1992. Physiological characteristics and ecological role of small and large sized bacteria in a polluted river (Seine River, France). *Arch. Hydrobiol. Ergebn. Limnol.*, 37 : 83-94.

Hellweger FL (2015) 100 Years since Streeter and Phelps: It Is Time To Update the Biology in Our Water Quality Models. *Env Sci Technol* 49:6372-6373. Doi:10.1021/acs.est5b02130

Jones, J.G. A method for observation and enumeration of epilithic algae directly on the surface of stones. *Oecologia* **16**, 1–8 (1974). <https://doi.org/10.1007/BF00345084>

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.

Servais, P., Billen, G., Vives-Rego, J. 1985. Rate of bacterial mortality in aquatic environments. *Appl. Environ. Microbiol.* 9 : 1448-1454

- Servais P., Billen G. & Hascoët M.C. 1987. Determination of the biodegradable fraction of dissolved organic matter in waters, *Wat Res.* 21 : 445-450
- Servais, P., Billen, G., Martinez, J. & Vives-Rego, J., 1989. Estimating bacterial mortality by the disappearance of ³H-labelled intracellular DNA. Technical validation and field measurements. *FEMS Microbiol. Ecology.* 62 : 119-126.
- Somville, M. & Billen, G., 1983. A method for determination exoproteolytic activity in natural waters. *Limnol. Oceanogr.* 28 : 190-194
- Streeter, H. W., & Phelps, E. B. (1925). A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Public health bulletin 146. *US Public Health Service, Washington, DC.*
- Tusseau-Vuillemin, M.-H., Garnier, J., Servais, P., Laroche, L., 2002. Charges domestiques spécifiques et rejets de station d'épuration. *Tech. rep.*, PIREN Seine.
- Vives-Rego, J., Billen, G., Fontingy, A. & Somville, M., 1984. Free and attached proteolytic activity in water environments. *Mar. Ecol. Progr. Ser.*, 21 : 245-249.