

**UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À RIMOUSKI**

**IMPACT DE LA STOCHASTICITÉ LIÉE AU MÉLANGE TURBULENT SUR LA  
DYNAMIQUE DU PHYTOPLANCTON**

**MÉMOIRE PRÉSENTÉ**

dans le cadre du programme de maîtrise en océanographie  
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences

**PAR**

**©JÉRÉMY BAUDRY**

**Septembre 2015**



**Composition du jury:**

**Gustavo Ferreyra, président du jury, UQAR-ISMER**

**Dany Dumont, directeur de recherche, UQAR-ISMER**

**Irene Schloss, codirecteur de recherche, UQAR-ISMER**

**Frédéric Maps, codirecteur de recherche, université Laval**

**Oliver N Ross, examinateur externe, Mediterranean Institute of oceanography**

Dépôt initial le 10 septembre 2015

Dépôt final le [date mois année]

---



# UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À RIMOUSKI

Service de la bibliothèque

## Avertissement

La diffusion de ce mémoire ou de cette thèse se fait dans le respect des droits de son auteur, qui a signé le formulaire *Autorisation de reproduire et de diffuser un rapport, un mémoire ou une thèse* . En signant ce formulaire, l'auteur concède à l'Université du Québec à Rimouski une licence non exclusive d'utilisation et de publication de la totalité ou d'une partie importante de son travail de recherche pour des fins pédagogiques et non commerciales. Plus précisément, l'auteur autorise l'Université du Québec à Rimouski à reproduire, diffuser, prêter, distribuer ou vendre des copies de son travail de recherche à des fins non commerciales sur quelque support que ce soit, y compris l'Internet. Cette licence et cette autorisation n'entraînent pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits moraux ni à ses droits de propriété intellectuelle. Sauf entente contraire, l'auteur conserve la liberté de diffuser et de commercialiser ou non ce travail dont il possède un exemplaire.



The most exciting phrase to hear in science, the one that heralds new discoveries, is not "Eureka!" but "That's funny..."

Isaac Asimov

---

## ***REMERCIEMENTS***

Je souhaite remercier toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce mémoire et qui ont été pour la plupart, une grande source d'inspiration.

Mes premiers remerciements s'adressent avant tout à mon directeur Dany Dumont, pour m'avoir tout d'abord donné l'opportunité de réaliser ce projet particulièrement intéressant, mais aussi et surtout pour nos innombrables discussions qui ont su éveiller ma curiosité, pour sa confiance vis-à-vis de mon travail ainsi que ses précieux conseils qui m'ont permis d'avancer dans les moments difficiles. Je tiens aussi à remercier mes co-directeurs Irene Schloss pour ses avis éclairés et Frédéric Maps ainsi que Gustavo Ferrera pour l'évaluation de ce mémoire. Merci aussi à Québec-Océan pour m'avoir permis d'effectuer un stage à Marseille. À ce propos, une pensée particulière s'adresse à Oliver Ross pour m'avoir d'une part accueilli durant ce stage qui a été très enrichissant pour ma compréhension des modèles lagrangiens et grâce auquel ce projet a pu aboutir et d'autre part pour sa participation à l'évaluation de ce mémoire.

Enfin, mes derniers remerciements s'adressent bien sûr à mes ami(e)s (ils se reconnaîtront) sans qui cette expérience à Rimouski n'aurait pas été la même et également à mes parents pour leur soutien malgré la distance.

---

## *RÉSUMÉ*

L'utilisation de la simulation numérique pour l'étude de dynamique du phytoplancton a reçu un grand intérêt de la part de la communauté scientifique autant à des fins théoriques que comme outil de gestion des écosystèmes marins. Le présent mémoire adresse la question de la représentation du phytoplancton dans les modèles. Il y est présentée une comparaison entre les formulations Eulérienne (population-centré) et Lagrangienne (individus-centré) d'un modèle simple de croissance du phytoplancton dans le but: 1) de caractériser l'importance de la prise en compte de la variabilité entre les différents membres d'une population, liée à leur historique de vie dans la colonne d'eau ainsi que 2) d'évaluer la manière dont le régime de turbulence module cette importance. La première partie de ce mémoire caractérise le comportement numérique et physique du modèle Lagrangien en fonction de la valeurs des paramètres utilisés dans le but d'établir un cadre précis pour la paramétrisation du modèle. La seconde partie présente le modèle biologique utilisé ainsi que les résultats de la comparaison des deux formulations. Les principaux résultats de cette étude montrent que l'omission de la variabilité entre individus dans les modèles Eulériens induisent une surestimation allant jusqu'à 15% de la biomasse totale selon certaines conditions de mélanges et que cette erreur est directement liée à la présence de gradients environnementaux ainsi qu'à la non-linéarité des processus biologiques.

Mots clés: Modélisation Lagrangienne, modélisation Eulérienne, phytoplancton, mélange turbulent

---



## *ABSTRACT*

Numerical models of phytoplankton dynamics are extensively used by the scientific community both for theoretical investigation and as a management tool for marine ecosystems. This thesis addresses the question of the representation of phytoplankton in models. A comparison between the Eulerian (population based) and Lagrangian (agent based) formulations of a simple model of phytoplankton growth is presented in order to: 1) characterize the importance of accounting for intrapopulation variability induced by different life histories of the cells in the water column, and 2) evaluate the role of turbulence in the establishment of this variability. The first part of this thesis characterizes the numerical and physical behaviour of the Lagrangian model as a function of the parameter values in order to provide a robust framework for the parametrization of the model. The second part of the thesis presents the biological model used and the results of the comparison. The main outcome is that not taking into account of variability among individuals in Eulerian models induces an overestimation up to 15% of the total biomass depending on mixing conditions. This error directly depends on the presence of environmental gradients and the non-linearity of biological processes.

Keywords: Lagrangian modelling, Eulerian modelling, phytoplankton, turbulent mixing

---

## TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS . . . . .	ix
RÉSUMÉ . . . . .	xi
ABSTRACT . . . . .	xiii
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	xv
LISTE DES TABLEAUX . . . . .	xvii
LISTE DES FIGURES . . . . .	xix
INTRODUCTION GÉNÉRALE . . . . .	1
0.1 Objectifs . . . . .	5
0.2 Organisation du mémoire et contributions . . . . .	5
CHAPITRE I	
DIFFUSION DE PARTICULES PASSIVES DANS UN CHAMPS TURBULENT: ANAL- YSE DE SENSIBILITÉ DE L' ALGORITHME LAGRANGIEN DE MARCHE ALÉATOIRE	7
1.1 Diffusion Eulérienne versus diffusion Lagrangienne . . . . .	7
1.2 Influence du nombre de particules . . . . .	10
1.3 Conditions de mélange et persistance du bruit . . . . .	14
CHAPITRE II	
A LAGRANGIAN VERSUS EULERIAN MODEL COMPARISON OF PHYTOPLANK- TON GROWTH . . . . .	21
2.1 Introduction . . . . .	22
2.2 The physical environment . . . . .	25
2.3 Biological model description . . . . .	26
2.3.1 Light . . . . .	26
2.3.2 Photosynthesis . . . . .	27
2.3.3 Phytoplankton mass balance . . . . .	27
2.3.4 Nutrient uptake . . . . .	28
2.3.5 Transport . . . . .	29
2.3.6 numerical aspects and stability . . . . .	30
2.3.7 Model verification . . . . .	32

---

2.4	Results . . . . .	33
2.4.1	Cell quota . . . . .	33
2.4.2	Growth rate . . . . .	35
2.4.3	Total biomass . . . . .	40
2.4.4	sensitivity analysis . . . . .	42
2.5	Discussion . . . . .	47
2.5.1	Other sources of heterogeneity . . . . .	49
2.5.2	Non-linearity . . . . .	50
2.6	Supporting information . . . . .	52
2.7	Aknowledgments . . . . .	53
	CONCLUSION GÉNÉRALE . . . . .	55
	RÉFÉRENCES . . . . .	59

*LISTE DES TABLEAUX*

1	Description of numerical experiments. . . . .	26
2	Model parameters. All parameters are chosen to be typical values and thus not attached to a specific phytoplankton species. Conditions are set to represent a coastal area during summer. Sources: 1:Broekhuizen (1999), 2:Dortch and Maske (1982), 3:Sharples (1999), 4:Brand and Guillard (1999). . . . .	31



## *LISTE DES FIGURES*

1	Concentration $C$ de phytoplancton après 1 jours dans un champs turbulent uniforme de diffusivité $K = 1 \times 10^{-5} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ . . . . .	12
2	Évolution de la diffusion d'une concentration $C$ de phytoplancton dans un champs turbulent uniforme ( $K = 1 \times 10^{-4} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) en fonction du nombre de particules par maille de grille. . . . .	13
3	Erreur quadratique moyenne entre la concentration calculée de manière Eulérienne et Lagrangienne en fonction du nombre de particules générées par maille de grille. La résolution de la grille $\delta z = 0.2 \text{ m}$ , la profondeur $h = 20 \text{ m}$ , la valeur de la diffusivité $K = 1 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ et la durée 5 jours sont identiques pour chaque simulation. . . . .	14
4	Gauche: anomalie de concentration en particules (en % de la moyenne) pour une diffusivité $K = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Droite: même chose pour une diffusivité de $K = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Le profil de diffusivité est uniforme et les particules ( $N = 5000$ ) sont réparties initialement de façon homogène sur toute la colonne d'eau. La résolution de la grille est $\Delta z = 0.2 \text{ m}$ . . . . .	15
5	Fonction d'auto-correlation (ACF) du signal Lagrangien en fonction de différentes valeurs de turbulence. . . . .	16
6	Temps de persistance des agrégats obtenue à l'aide de la fonction d'auto-corrélation du signal Lagrangien. . . . .	17
7	Gauche: évolution temporelle de la biomasse totale en phytoplancton (mol C) et de la moyenne de la concentration en nutriments (mol N $\text{m}^{-3}$ ). Droite: anomalie de concentration en nutriments dans la colonne d'eau (% par rapport à la moyenne). Les contours noirs représentent des agrégats de phytoplancton. . . . .	18
8	Gauche: évolution temporelle de la biomasse totale en phytoplancton (mol C) et de la moyenne de la concentration en nutriments (mol N $\text{m}^{-3}$ ). Droite: Anomalie de concentration en nutriments dans la colonne d'eau (% par rapport à la moyenne). Les contours noirs représentent des agrégats de phytoplancton. . . . .	19
9	Mixing scenarios used in the second set of experiments. Top: constant wind scenario. Middle: variable wind scenario. Below: tidal mixing scenario calculated from a $M_2$ tide period with mean current speed of $0.5 \text{ m s}^{-1}$ . . . . .	25

---

10	Validation experiment simulating a well mixed water column with neither light nor nutrient gradients. a) Evolution of the total biomass in the water column. b) Evolution of the mean cell quota $N:C$ , $Q$ . . . . .	32
11	Instantaneous mean cell quota $Q$ profile after 10 days for Eulerian and Lagrangian simulations. . . . .	34
12	Profile of external nutrient concentrations in mol $NO_3$ $m^{-3}$ for scenarios 1-4. . . . .	35
13	Instantaneous mean growth rate $\mu_g$ profile after 10 days for Eulerian and Lagrangian simulations. . . . .	37
14	Left: intrapopulation distribution of cell quotas in the Lagrangian model at $t=10$ days and $z= -5m$ for scenarios 1-4. Right: intrapopulation distribution of growth rate in the Lagrangian model at $t=10$ days and $z= -5m$ for scenarios 1-4. (see Table 1 for the description of the experiment) . . . . .	38
15	Left: intrapopulation distribution of cell quotas in the Lagrangian model at days and $z= -5m$ for scenario 3. Right: intrapopulation distribution of growth rate in the Lagrangian model at 5,8,12,30 40 days and $z= -5m$ for experiment 3. (see Table 1 for the description of the experiment) . . . . .	39
16	Top: instantaneous mean growth rate $\mu_g$ profile at 5,8,12,30,40 days for Eulerian and Lagrangian simulations. Bottom: instantaneous mean cell quota $Q$ profile after 5, 8, 12, 30, 40 days for Eulerian and Lagrangian simulations. . . . .	40
17	Eulerian and Lagrangian simulation of the total biomass for scenarios 1-4. See Table 1 for description of experiments. . . . .	41
18	Root-Mean-Square error of the total biomass between Lagrangian and Eulerian simulations for different mixing scenarios. See Table 1 for description of scenarios. . . . .	42
19	Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2}m^2 s^{-1}$ ) and maximum storage quota $Q_{MAX}$ of 0.15, 0.2, 0.25, 0.3 and 0.5 mol $NO_3$ mol $C^{-1}$ . . . . .	44
20	Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2}m^2 s^{-1}$ ) and nutrient uptake rate $V_{MAX}$ of 0.1, 0.2, 0.4 and 0.8 mol $NO_3$ mol $C^{-1} d^{-1}$ . . . . .	44



---

21	Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) and maximum growth rate $\mu_{max}$ of 0.5, 1, 1.5, 2 and $2.5 \text{d}^{-1}$ . . . . .	45
22	Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$ ) and a depth of 10,20,40,100 and 200m. . . . .	46
23	Root-Mean-Square error of the total biomass between Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) and initial nutrients concentrations of $10^{-4}$ , $5 \cdot 10^{-4}$ , $10^{-3}$ , $5 \cdot 10^{-3}$ and $10^{-2} \text{ mol NO}_3 \text{ m}^{-3}$ . . . . .	47
24	Eulerian and Lagrangian simulations of phytoplankton growth using Monod's equations. a) Total biomass. b) Growth rate profile after 15 days . . . . .	51
25	Eulerian and Lagrangian simulations of phytoplankton growth using linearised Droop equations. a) Total biomass. b) Growth rate profile after 15 days . . . . .	52

---

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les écosystèmes planctoniques marins sont des systèmes particulièrement complexes. Le vaste nombre de facteurs biologiques et environnementaux qui contrôlent simultanément leur dynamique rendent leur compréhension particulièrement difficile. La manière dont les organismes interagissent avec leur environnement est fondamental car contrairement aux systèmes terrestres, l'océan est un milieu en perpétuel mouvement. Par définition, le mode de vie planctonique de ces organismes ne leur permettent pas de s'affranchir des mouvements des masses d'eau. Les propriétés hydrodynamiques influencent donc bon nombre de processus biologiques incluant les processus de croissance et de photosynthèse (Marra, 1978; Denman and Gargett, 1983; Lewis et al., 1984), la composition des communauté (Margalef, 1978) ou encore la répartition spatiale des organismes dans la colonne d'eau (Denman and Platt, 1976; Yamazaki et al., 2006). Notre compréhension de la dynamique du phytoplancton en milieu marin passe donc nécessairement par une meilleure caractérisation des interactions entre ces organismes et leur environnement physique.

L'utilisation de la simulation numérique s'impose désormais comme un outil incontournable en écologie marine. Son intérêt réside dans sa capacité à fournir un point de vue global des processus en jeu et leurs mécanismes sous-jacents (Cianelli et al., 2011). À mesure que notre connaissance de la physiologie des organismes et de leurs interactions progresse, les modèles n'ont de cesse de se complexifier en incorporant un large éventail de processus biologiques reposant sur des représentations de plus en plus mécanistiques (Baklouti et al., 2006). Il existe pourtant pour un même processus, de nombreuses façons de le représenter dans un modèle mathématique avec pour chacune son comportement propre, ses hypothèses sous-jacentes ainsi que sa part d'incertitude. Le comportement souvent non-linéaire de ces processus pose une barrière importante au modélisateur pour tester ces différentes approches dans le cadre d'un modèle complexe. Plus un modèle devient complexe, plus l'incertitude entourant les résultats augmente (Franks, 2002). Il est donc fondamental de parfois emprunter

---

le chemin inverse et réduire un modèle à sa plus simple forme pour tester les paradigmes sur lesquels il repose et c'est en grande partie ce qui a motivé ce projet. Cette étude aborde en effet le thème de la représentation du phytoplancton au sein des modèles. Elle correspond dans un certain sens à la toute première étape dans le cheminement qui conduit à la construction d'un modèle.

Traditionnellement, les modèles utilisés en écologie du phytoplancton sont basés sur une approche Eulérienne (aka *lumped models*, *bulk models*, *population based models*) dans laquelle le phytoplancton est représenté au niveau de la population, sous forme de concentration (ex: mol C L<sup>-1</sup>). Par exemple, le phytoplancton réagit avec des nutriments et la lumière pour donner plus de phytoplancton. Les organismes sont donc en quelque sorte considérés équivalents à des molécules chimiques identiques et interchangeables (Hellweger and Bucci, 2009). Pour nous permettre une telle représentation, il nous faut admettre certaines hypothèses. La première est la présence d'un continuum qui approxime ainsi une population constituée d'un grand nombre d'individus intrinsèquement discrets par une densité continue. La deuxième est l'hypothèse d'ergodicité selon laquelle les individus d'une population sont identiques et interchangeables tels des molécules au sein d'un gaz. Si ces hypothèses semblent dénuées de sens pour des organismes des hauts échelons trophiques, elles se sont imposées comme une bonne approximation pour l'étude des micro-organismes (Hellweger and Bucci, 2009). Une des raisons à cela provient du fait que les observations réalisées sur le terrain se sont longtemps restreintes à décrire le phytoplancton au niveau de la population en la quantifiant par exemple en terme de biomasse en carbone. Il apparaît donc légitime de représenter le phytoplancton de la même manière dans les modèles. Ce type de représentation est encore à l'heure actuelle très largement répandue. Elle a été historiquement appliquée à des fins théoriques, d'une part pour caractériser le comportement d'un modèle en fonction de sa structure et de sa paramétrisation (Jassby and Platt, 1976) et d'autre part pour explorer les interactions entre les nombreux processus biologiques qui interviennent dans la dynamique des écosystèmes tels que la compétition interspécifique (Huisman et al., 2004), la limitation par les nutriments (Tilman et al., 1982) ou encore l'effet de la prédation

---

(Steele and Henderson, 1992). Ces exemples d'applications répondent pour la plupart de façon qualitative aux questions que l'on se pose. De plus récentes études tentent de réaliser des comparaisons plus quantitatives avec des données de terrain à des fins de prédictions et d'utilisation comme outil de gestion des risques d'eutrophisation (Hamilton and Schladow, 1997), d'efflorescences toxiques ou encore pour caractériser la réponse des écosystèmes face aux changements climatiques (Boyd and Doney, 2002).

Aux antipodes de cette approche, une autre classe de modèles désignés communément comme Lagrangiens (aka *individual based model* ou *agent based model*) a fait assez récemment son apparition en écologie du phytoplancton. Traditionnellement appliquée à l'étude des organismes de plus hauts échelons trophiques tels que les poissons et le zooplancton, cette approche tend à se généraliser pour l'étude des micro-organismes. L'approche Lagrangienne, a contrario de son homologue Eulérienne, simule explicitement chaque individu ou groupe d'individus qui composent une population. Le comportement de l'ensemble de la population émerge ainsi du comportement cumulé des individus qui la composent (Hellweger and Bucci, 2009). Une des raisons fondamentales qui motive l'utilisation de l'approche Lagrangienne est la possibilité de représenter des processus intrinsèquement individuels tels que les processus de photo-acclimatation (Kamykowski et al., 1994; Nagai et al., 2003), d'aggrégation (Saadi and Bah, 2007), de sédimentation (Ross, 2006) ou encore de nage (Ross and Sharples, 2008). Une autre grande raison provient de la prise de conscience de la grande plasticité comportementale et physiologique des individus d'une même espèce, remettant ainsi en cause l'hypothèse d'ergodicité de l'approche Eulérienne. L'existence et l'importance de la variabilité entre les individus au sein même d'une population est en effet de plus en plus reconnue notamment par l'acquisition d'observations telles que l'activité respiratoire, le ratio Chl:C ou encore la quantité de nutriments intracellulaire à l'échelle individuelle. Par exemple, l'estimation des paramètres du modèle de photosynthèse-irradiance (Platt et al., 1980) réalisée par Martin et al. (2012) à l'aide de données in-situ prélevées dans l'Arctique canadien montre une distribution assez large de la valeur de ces paramètres au sein d'un même échantillon. Les mécanismes responsables de cette variabilité intrapopulationnelle sont mul-

---

tiples. L'un de ces mécanismes est la variabilité créée lors de la fission des cellules. Il existe certains cas où les cellules filles sont physiologiquement différentes du fait de mutations génétiques lors de la division (Hellweger and Bucci, 2009). La croissance et le taux de renouvellement rapide des cellules permet de maintenir par la suite ces différences au sein d'une population. Le principal mécanisme responsable de la variabilité entre les individus reste toutefois l'historique de vie différent des cellules dans la colonne d'eau. En effet, la turbulence générée par les flux de chaleur, de sel et de quantité de mouvement à la surface de l'océan crée un environnement dans lequel les cellules phytoplanctoniques sont transportées verticalement de manière aléatoire. Elles peuvent ainsi subir à des échelles de temps très courtes, des déplacements verticaux de plusieurs dizaines de mètres et faire face, dans un milieu stratifié, à des conditions environnementales très variables (éclairage, quantité de nutriments). Or, ces organismes sont capables de s'acclimater sur une échelle de temps de quelques heures à cet environnement changeant en adoptant différentes stratégies affectant leur motilité (Durham et al., 2009) ou leur flottabilité, ou en optimisant leur métabolisme (ex: photo-acclimatation) (Perry et al., 1981). En raison de cette stochasticité inhérente à la turbulence, chaque individu d'une population possède en principe son propre historique de vie dans la colonne d'eau et répond de manière unique aux conditions physiques dans lesquels la population évolue. Cet aspect n'est tout simplement pas pris en compte dans les modèles Eulériens.

Au delà de l'évidente différence qu'il existe entre l'approche Eulérienne et Lagrangienne, un nombre croissant d'auteurs soutiennent que seule l'approche Lagrangienne est correcte dans le sens où elle ne fait pas l'hypothèse de propriétés moyennes (Woods and Onken, 1982; Schuler, 2005; Hellweger and Kianirad, 2007). Pour autant, la grande majorité des modèles utilisés à l'heure actuelle reposent toujours sur le paradigme Eulérien. C'est sur la base de cette apparente controverse que s'est construit ce projet. La question est donc de savoir si les différences de comportements entre les individus influencent de façon significative le comportement de l'ensemble de la population. Si oui, la question demeure de savoir de quelle façon la variabilité spatio-temporelle du régime de turbulence module cette

importance. En d'autres termes, existerait-il des conditions de mélange pour lesquelles il est nécessaire de prendre en compte les comportements individuels pour simuler de façon réaliste la dynamique de l'ensemble d'une population? Une réponse à ces questions permettra une meilleure représentation du comportement du phytoplancton en milieu marin dans les modèles.

## **0.1 Objectifs**

L'objectif principal est donc de caractériser l'impact de la stochasticité liée au mélange turbulent sur la productivité, la répartition spatiale ainsi que la sensibilité aux conditions environnementales du phytoplancton. Il s'agit de déterminer l'importance des différences entre les individus liées à leur historique d'exposition aux facteurs environnementaux dans la colonne d'eau.

La méthode qui permet d'accomplir cet objectif consiste à réaliser une comparaison des résultats d'un modèle simple de croissance du phytoplancton intégré de manière Eulérienne et Lagrangienne à travers différents scénarios:

- 1) Sous conditions de mélange stationnaire;
- 2) Avec des conditions de mélange variables dans le temps.

## **0.2 Organisation du mémoire et contributions**

Ce mémoire est organisé selon deux grands chapitres. Le premier, intitulé "Diffusion de particules passives dans un champs turbulent: Analyse de sensibilité de l'algorithme Lagrangien de marche aléatoire" présente l'étude de sensibilité du modèle Lagrangien réalisée dans le but d'établir un cadre précis pour la paramétrisation du modèle. Le second, formulé sous forme d'un article scientifique qui sera soumis après dépôt de ce mémoire, s'intitule

---

« A Lagrangian versus Eulerian model comparison of phytoplankton growth ». Il présente en détail le modèle utilisé ainsi que les résultats de la comparaison des simulations Eulérienne et Lagrangienne.

Une première version du modèle incluant seulement la formulation Lagrangienne des processus de diffusion a en premier lieu été codée en MATLAB. Cette étape a permis d'apporter une partie des réponses aux questions soulevées dans la première partie de ce mémoire.

Une seconde version du modèle incluant les formulations Eulérienne et Lagrangienne ainsi que tous les processus biologiques (croissance, photosynthèse) présentés dans la seconde partie de ce mémoire a par la suite été réalisée. Ce modèle a été construit de façon à réaliser des comparaisons entre les deux formulations et permet d'implémenter facilement d'autres processus biologiques non pris en compte dans cette étude. L'idée derrière ce modèle est de fournir un outil modulable simple d'utilisation pour tout utilisateur qui souhaiterait comparer les deux formulations dans le cadre de sa propre étude. Une version du code FORTRAN est accessible en libre accès via la plateforme Gitlab. ([https://gitlasso.uqar.ca/bauj0001/PHYTO\\_LAGRANGIAN\\_MODEL.git](https://gitlasso.uqar.ca/bauj0001/PHYTO_LAGRANGIAN_MODEL.git))



## CHAPITRE I

### DIFFUSION DE PARTICULES PASSIVES DANS UN CHAMPS TURBULENT: ANALYSE DE SENSIBILITÉ DE L'ALGORITHME LAGRANGIEN DE MARCHÉ ALÉATOIRE

Le but de ce premier chapitre est d'une part de définir les spécificités et différences entre les approches Lagrangienne et Eulérienne et d'autre part d'explorer le comportement physique et numérique de l'approche Lagrangienne dans l'intérêt d'établir un cadre pour la comparaison des deux modèles. À des fins de simplifications, on se place pour cette étude dans un cadre unidimensionnel. Nous nous restreindrons donc à représenter les processus qui se déroulent selon la composante verticale dans la colonne d'eau. Ce choix est discuté dans la section discussion(2.7) du chapitre 2.

#### 1.1 Diffusion Eulérienne versus diffusion Lagrangienne

Comme énoncé en introduction, la différence fondamentale entre les formulations Eulerienne et Lagrangienne repose sur la façon de représenter le phytoplancton. Dans le cadre Eulerien, le phytoplancton est représenté sous forme de concentration (ex: mol C L<sup>-1</sup>). La dynamique de l'ensemble de la population est décrite par des equations dites d'advection-diffusion-réaction:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{diffusion}} \overbrace{-v \frac{\partial C}{\partial z}}^{\text{advection}} + \text{réaction} \quad (1.1)$$

où  $C$  est la concentration en phytoplancton,  $K$  le coefficient de diffusivité et  $v$  la vitesse de chute .

La partie réaction de ces équations correspond au modèle biologique. Littéralement,

elle décrit la façon dont la population «réagit» avec son environnement. Elle englobe ainsi tous les termes liés à la croissance par photosynthèse, la mortalité, la prise de nutriments, etc... Les deux autres termes, l'advection et la diffusion, correspondent à la partie physique du modèle où l'on décrit le mouvement du phytoplancton dans la colonne d'eau. L'advection regroupe par exemple les termes liés à la sédimentation du phytoplancton ou encore à l'effet d'un courant (on rajoutera ainsi une composante de vitesse de courant). La diffusion correspond littéralement à la façon dont une concentration de phytoplancton va progressivement être diffusée dans la colonne d'eau en présence de mélange turbulent lié par exemple à la contrainte (stress) du vent à la surface ou encore la contrainte au fond liée au passage d'une onde de marée. Dans l'approche Lagrangienne, chaque cellule ou groupe de cellules est explicitement représenté par des particules individuelles. De la même façon, chaque particule se déplace dans la colonne d'eau sous l'effet de l'advection et du mélange et réagit avec son environnement, par exemple en se divisant si les conditions de lumière et de nutriments le permettent. Compte tenu de la nature intrinsèquement discrète de cette approche, on ne peut ici utiliser des opérateurs d'advection et de diffusion qui ne s'appliquent que dans le cas d'un continuum. À l'échelle d'une particule, le processus de diffusion peut être assimilé à un mouvement Brownien. C'est-à-dire que chaque particule soumise à un champ de diffusivité, décrit un déplacement aléatoire que l'on peut représenter par un processus Markovien dit de marche aléatoire (Okubo, 1980; Yamazaki and Kamykowski, 1991; Kamykowski et al., 1994). Sommé sur un très grand nombre de particules, le mouvement de l'ensemble de la population doit être équivalent à l'approche eulérienne. De nombreux modèles de marche aléatoire existent dans la littérature, cependant, Hunter et al. (1993); Visser (1997) ont montré que tous ne sont pas applicables notamment dans des environnements où la diffusivité est non-uniforme. Ces derniers ont démontrés qu'un modèle correct de marche aléatoire peut être obtenu en calculant les moments de la distribution (ou concentration) des particules dans la colonne d'eau. En considérant uniquement la dimension  $z$  de l'espace, le moment  $n$  de la

concentration en phytoplancton à un instant  $t$  peut être décrit par:

$$M_n(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n C(t, z) dz \quad (1.2)$$

et le moment normalisé

$$N_n = \frac{M_n}{M_0} \quad (1.3)$$

Dans le cadre d'un processus de diffusion, la variation dans le temps de ces moments devient:

$$\frac{dN_n}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial C}{\partial z} \right) dz \quad (1.4)$$

Après integration par partie, et en considérant que le profil de diffusivité peut être localement approximé par la série de Taylor à l'ordre 1  $K(z) = K_0 + K'_0 z$ , on obtient:

$$\frac{dN_n}{dt} = K_0 n(n-1) N_{n-2} + K'_0 n^2 N_{n-1} \quad (1.5)$$

En considérant que  $N_0 = 1$ ,  $N_1 = 0$  et  $N_2 = 0$  à  $t = 0$  on peut déterminer:

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{d\langle z \rangle}{dt} = K'_0 \Rightarrow N_1(t) = K'_0 t \quad (1.6)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \frac{d\langle z^2 \rangle}{dt} = 2K_0 + 4K'_0 N_1 \Rightarrow N_2(t) = 2K_0 t + 2K'_0 t^2 \quad (1.7)$$

Pour représenter correctement le processus de diffusion, l'équation de marche aléatoire doit posséder les mêmes moments  $N_1$  et  $N_2$ . Ainsi, pour un processus aléatoire de moyenne  $\langle R \rangle = 0$  et de variance  $r$  l'équation de marche aléatoire est donnée par (Visser, 1997):

$$z_{n+1} = z_n + K'(z_n) \Delta t + R \left[ \frac{2K \left( z_n + \frac{1}{2} K'(z_n) \Delta t \right) \Delta t}{r} \right]^{1/2} \quad (1.8)$$

où  $z_{n+1}$  et  $z_n$  correspondent à la position verticale d'une particule respectivement au temps  $n+1$  et  $n$ . Concrètement, chaque particule est transportée aléatoirement vers le haut ou le bas

à chaque pas de temps  $\Delta t$  et l'amplitude du déplacement dépend de la valeur de la diffusivité  $K$ . En ajoutant le processus d'advection, (1.8) devient:

$$z_{n+1} = z_n - \underbrace{v\Delta t}_{\text{advection}} + \underbrace{K'(z_n)\Delta t + R \left[ \frac{2K(z_n + \frac{1}{2}K'(z_n)\Delta t)\Delta t}{r} \right]^{1/2}}_{\text{diffusion}} \quad (1.9)$$

On détermine aussi des conditions aux frontières rebondissantes afin de s'assurer que les particules ne sortent pas du domaine:

$$z_{n+1} = \begin{cases} -z_{n+1} & \text{if } z_{n+1} < 0 \\ 2H - z_{n+1} & \text{if } z_{n+1} > H \end{cases} \quad (1.10)$$

où  $H$  est la profondeur de la colonne d'eau (m).

Bien que l'utilisation du modèle de marche aléatoire semble être une manière simple de représenter les processus d'advection-diffusion dans un cadre Lagrangien, une mauvaise paramétrisation de celui-ci peut entraîner des erreurs. [Visser \(2008\)](#); [Ross and Sharples \(2004\)](#) discutèrent de nombreuses questions entourant l'utilisation du modèle de marche aléatoire notamment dans le cadre de diffusivité non-uniforme comme l'importance des conditions aux frontières ainsi que la dérivabilité du profil de diffusivité. L'objectif dans la suite de ce chapitre est d'aller un peu plus loin dans cette démarche en étudiant le comportement du modèle de marche aléatoire en fonction de certains paramètres tels que le nombre de particules, la valeur de la diffusivité ainsi que la résolution de la grille utilisée.

## 1.2 Influence du nombre de particules

Une grande lacune que l'on retrouve dans la littérature concernant l'utilisation de modèle Lagrangiens est l'absence quasi totale de réelle étude du comportement de l'algorithme de marche aléatoire qui joue pourtant un rôle central dans le modèle. Prenons par exemple le

nombre de particules. En milieu naturel, le nombre de cellules phytoplanctoniques peut être particulièrement grand. Considérons par exemple un milieu dans lequel la concentration en phytoplancton est de  $12 \text{ mg C L}^{-1}$ , ce qui correspond à des conditions eutrophiques (Hellweger and Kianirad, 2007). Si on assume que le diamètre moyen de l'espèce de diatomée *skeletonema costatum* est d'environ  $150 \mu\text{m}$  avec un poids correspondant moyen de  $20 \text{ pg C cellule}^{-1}$  alors il y aurait  $6 \times 10^8 \text{ cellules L}^{-1}$ . Il est donc impossible de modéliser chacune de ces cellules. Il incombe donc au modélisateur de choisir le nombre de particules qu'il décide de suivre dans le modèle. Ce choix a toujours historiquement posé un problème d'ordre pratique pour les modélisateurs. En effet, il s'agit de faire la part entre la qualité des résultats et le temps de calcul qui peut être très long si on génère un très grand nombre de particules. Malgré son importance, ce choix est souvent fait de manière arbitraire. Pour illustrer cette importance, nous avons simulé la diffusion d'une concentration  $C$  de phytoplancton dans un champ de diffusivité uniforme de manière Eulérienne et Lagrangienne. Ne s'intéressant qu'à la physique du modèle lié au mélange, on néglige ici les termes de réaction et d'advection. Ceci correspond donc dans le cadre Lagrangien à générer un certain nombre de particules passives et non-réactives. On peut voir sur la figure 1 que la concentration calculée de façon Lagrangienne est "bruitée". Clairement, l'amplitude de ce bruit est lié au nombre de particules générées ainsi qu'à la résolution de la grille. Plus le nombre de particules par maille de grille est important, plus ce bruit sera atténué. La figure 2 montre les résultats de ces simulations avec différents nombres de particules initialement générées. Plus ce nombre est grand plus la solution calculée de façon Lagrangienne tend vers la solution Eulérienne. Pour maximiser la justesse du modèle Lagrangien, on peut donc soit augmenter le nombre de particules, soit diminuer la résolution spatiale du modèle. Afin de caractériser l'évolution de ce bruit en fonction du nombre de particules, nous avons réalisé une série de simulations avec un nombre croissant de particules initialement réparties de manière homogène sur toute la colonne d'eau. L'erreur moyenne quadratique (RMSE ou la variance) entre les résultats issus des simulations Lagrangiennes et des résultats attendus de façon Eulérienne a ensuite été

calculée par

$$\text{RSME} = \left[ \frac{\sum_{n=0}^T \sum_{i=0}^{\text{depth}} (E_{i,n} - L_{i,n})^2}{\sum_{n=0}^T \sum_{i=0}^{\text{depth}} E_{i,n}^2} \right]^{1/2} \quad (1.11)$$

où  $E_{i,n}$  et  $L_{i,n}$  représentent respectivement la concentration calculée de manière Eulérienne et Lagrangienne à une profondeur  $i$  et un temps  $n$ . Les résultats sont présentés à la figure 3. L'erreur commise dans les simulations Lagrangiennes diminue de façon exponentielle à mesure que l'on augmente le nombre de particules. Celle-ci commence à devenir acceptable ( $\text{RMSE} < 10\%$ ) vers  $10^2 - 10^3$  particules par maille de grille.

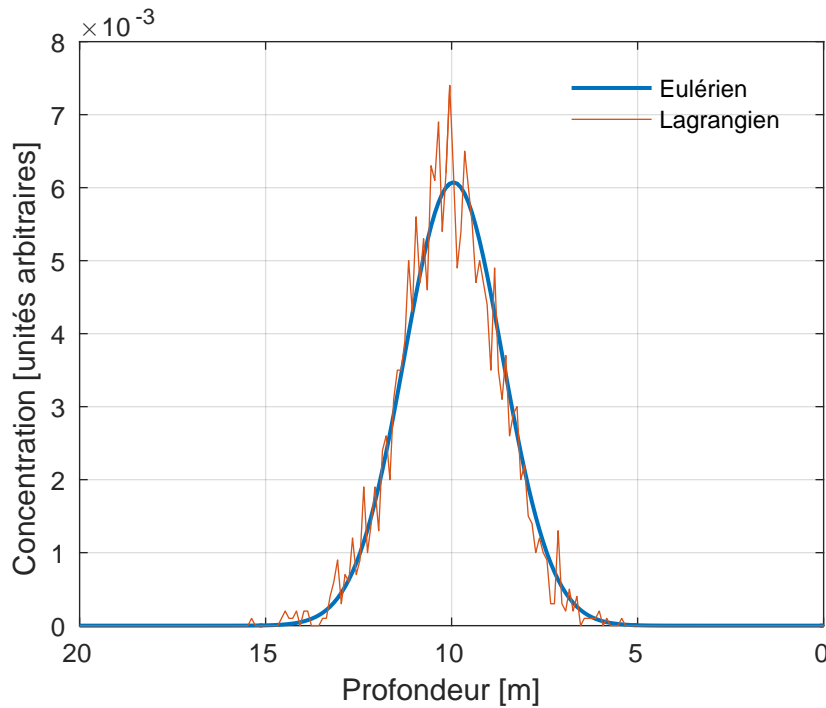


Figure 1: Concentration  $C$  de phytoplancton après 1 jours dans un champs turbulent uniforme de diffusivité  $K = 1 \times 10^{-5} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ .

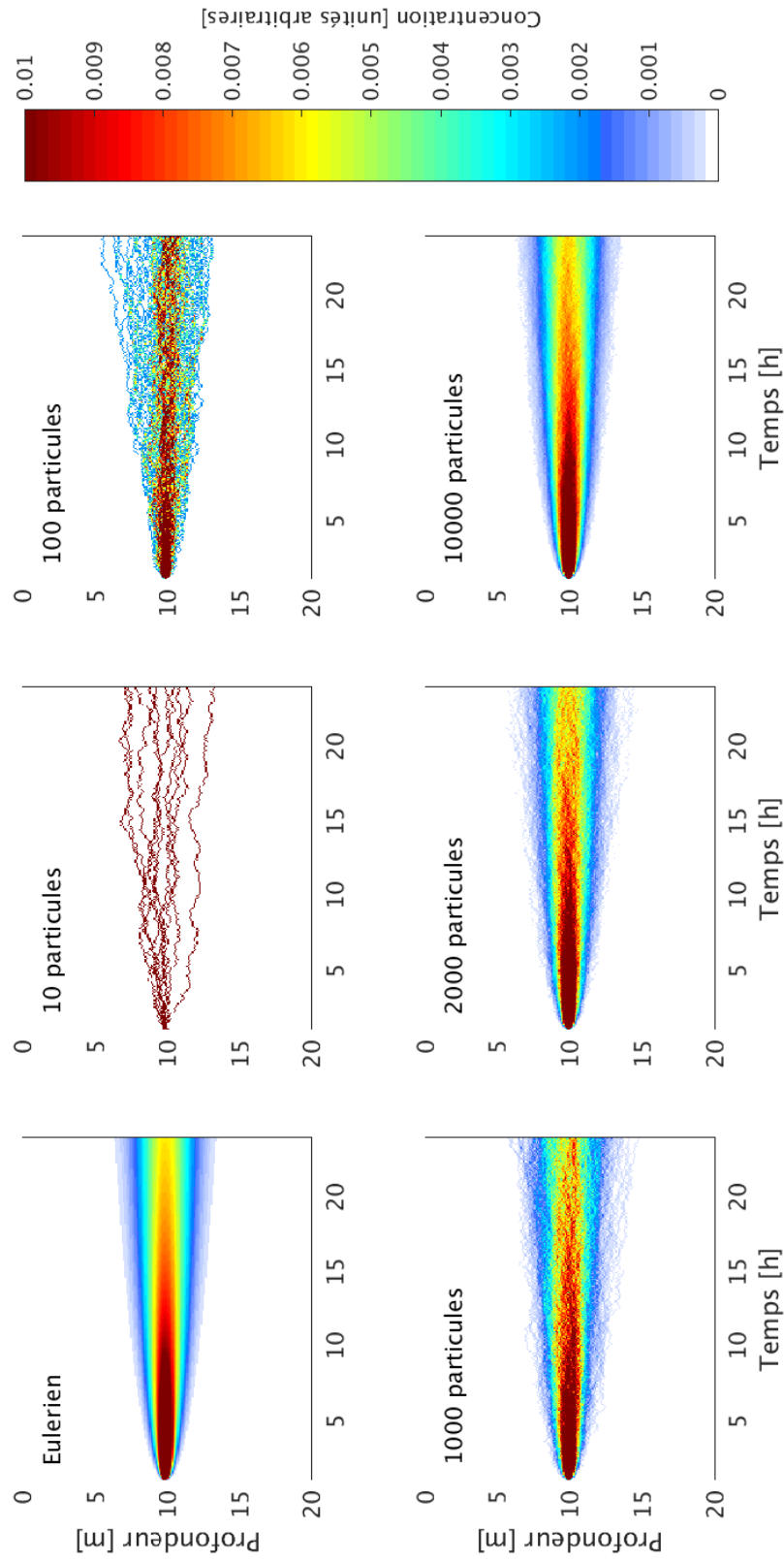


Figure 2: Évolution de la diffusion d'une concentration  $C$  de phytoplancton dans un champs turbulent uniforme ( $K = 1 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ) en fonction du nombre de particules par maille de grille.

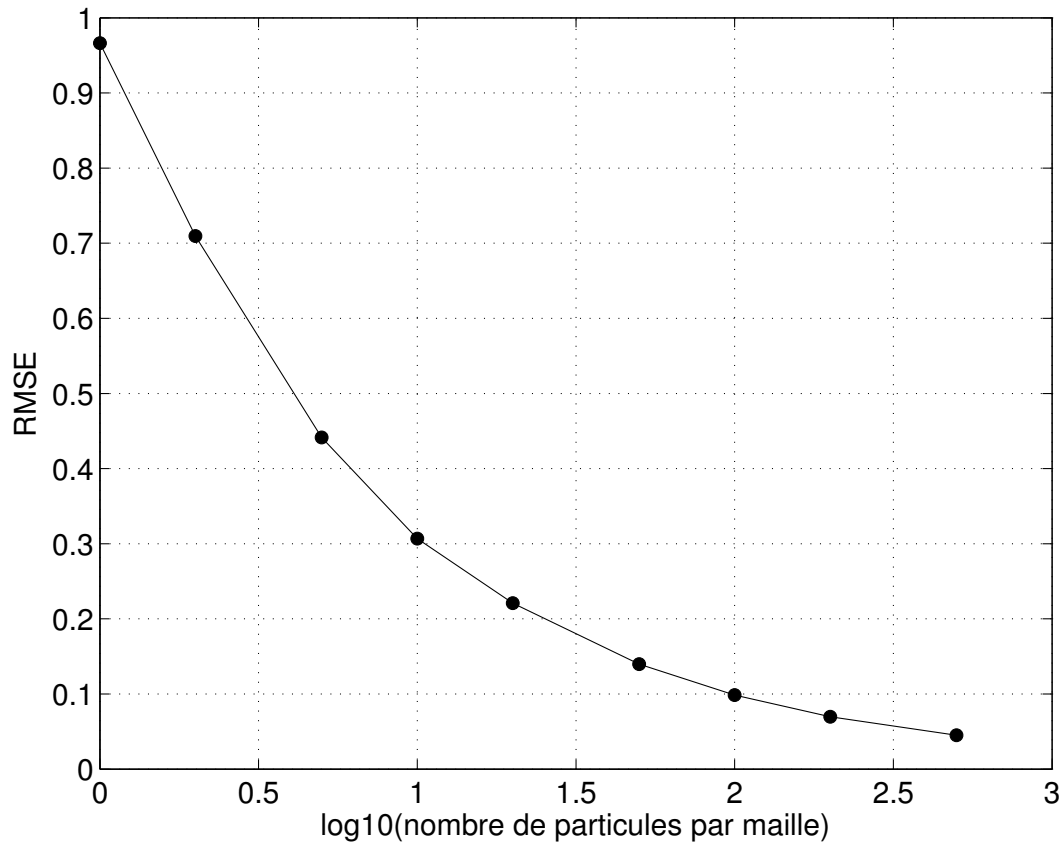


Figure 3: Erreur quadratique moyenne entre la concentration calculée de manière Eulérienne et Lagrangienne en fonction du nombre de particules générées par maille de grille. La résolution de la grille  $\delta z = 0.2$  m , la profondeur  $h = 20$  m, la valeur de la diffusivité  $K = 1 \times 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  et la durée 5 jours sont identiques pour chaque simulation.

### 1.3 Conditions de mélange et persistance du bruit

Dans la section précédente, nous avons caractérisé la variance du bruit du signal Lagrangien issue de l'algorithme de marche aléatoire. Dans cette section, l'objectif est de comprendre l'impact de la valeur de la diffusivité sur ce bruit. La figure 4 montre un bon exemple de cet impact. Si la diffusivité est forte ( $> 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ ), les petites accumulations créées par le caractère aléatoire de l'algorithme changent à chaque pas de temps et le bruit du signal peut



être assimilé à du bruit blanc. En revanche dans le cas où la diffusivité est faible, ces petites accumulations tendent à persister plus longtemps formant ainsi ce que l'on va appeler ici des "agrégats". On peut donc définir un temps de persistance de ces agrégats directement en fonction des conditions de mélange.

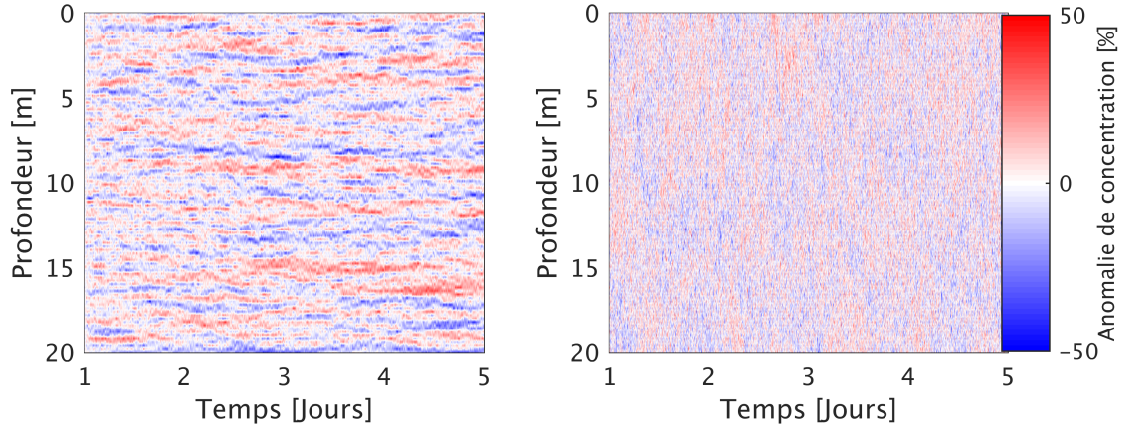


Figure 4: Gauche: anomalie de concentration en particules (en % de la moyenne) pour une diffusivité  $K = 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ . Droite: même chose pour une diffusivité de  $K = 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ . Le profil de diffusivité est uniforme et les particules ( $N = 5000$ ) sont réparties initialement de façon homogène sur toute la colonne d'eau. La résolution de la grille est  $\Delta z = 0.2\text{m}$

Afin de caractériser ce temps significatif que l'on note ici  $T_p$ , une série de simulations de la diffusion de particules passives non réactives initialement distribuées de façon homogène dans la colonne d'eau a été réalisé sous différentes valeurs de turbulence ( $1e^{-6}$  -  $1e^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ ). Nous utilisons ensuite la fonction d'auto-corrélation du signal Lagrangien donnée par

$$ACF_{(i,h)} = \frac{E[(x_{i,t+h} - \bar{x}_i)(x_{t,i} - \bar{x}_i)]}{E[(x_{t,i} - \bar{x}_i)^2]} \quad (1.12)$$

Le temps de décorrélation du signal correspond approximativement au temps de persistance des agrégats.

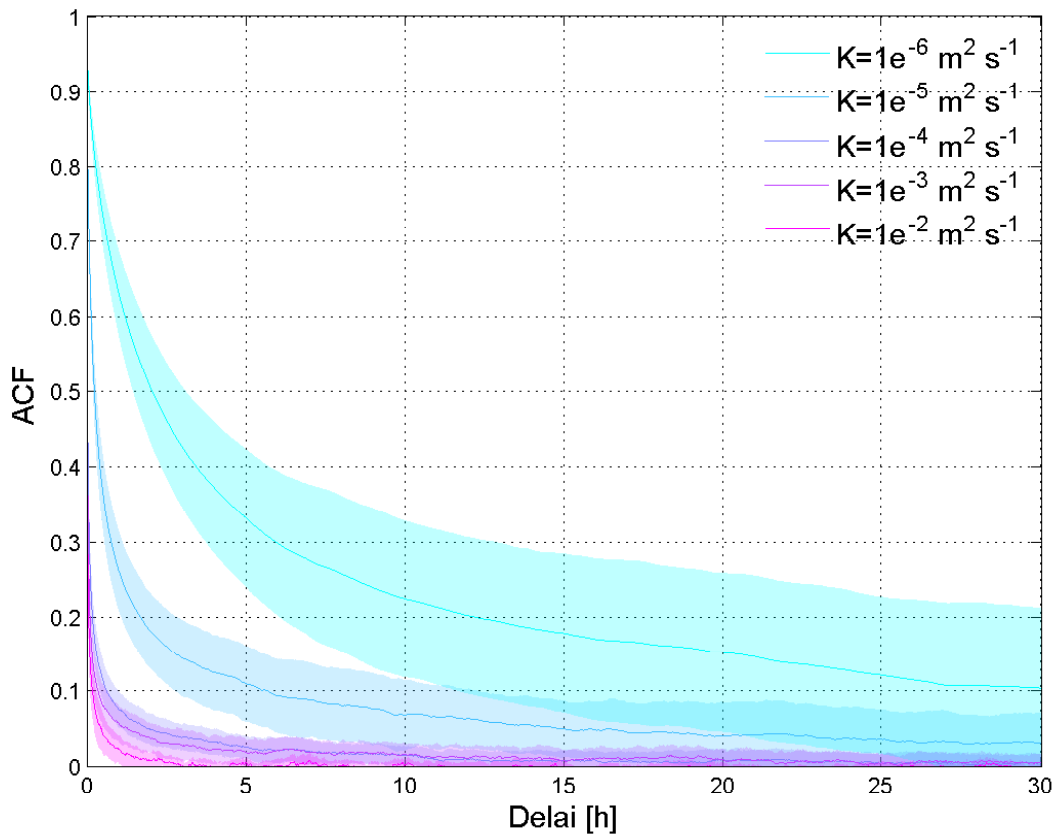


Figure 5: Fonction d'auto-correlation (ACF) du signal Lagrangien en fonction de différentes valeurs de turbulence.

Afin d'obtenir une approximation du temps de décorrélation, la courbe d'auto-corrélation obtenue est approximée par une fonction décroissante de la forme:

$$Y = 1 - \frac{t}{\tau + t} \quad (1.13)$$

avec  $t$  le temps de délai. Nous déterminons que le temps de persistance correspond à  $10\tau$ .

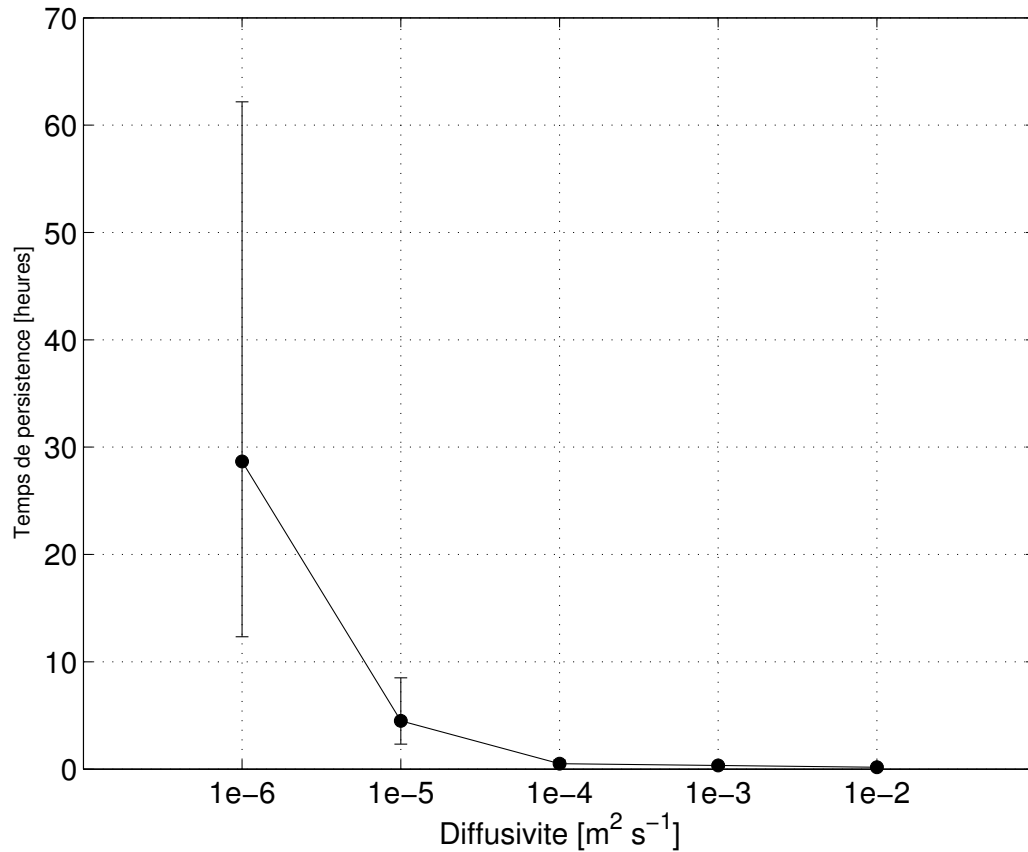


Figure 6: Temps de persistance des agrégats obtenue à l'aide de la fonction d'auto-corrélation du signal Lagrangien.

La figure 6 montre que pour de très faibles valeurs de  $K$  ( $10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ), le temps de persistance des agrégats est de l'ordre de un à quelques jours. Ceci est typiquement du même ordre de grandeur que certains temps biologiques tels que les temps de prise de nutriments et de croissance (1-2 divisions par jours). Ainsi, on peut penser que pour un faible mélange, la présence de ces agrégats pourrait influencer le comportement biologique du modèle Lagrangien. Par exemple, compte tenu du fait que l'absorption de nutriments dépend directement de la concentration en phytoplancton, on peut penser qu'une accumulation locale de cellules qui persiste sur une durée de l'ordre de quelques jours engendre une diminution locale de la concentration en nutriments. Autrement dit, l'hétérogénéité observée dans le

champs de phytoplancton devrait se répercuter dans le champs de nutriments. Afin de vérifier cette hypothèse, des simulations de la croissance du phytoplancton on été réalisées pour de faible valeurs de  $K$  ( $10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ) et pour différentes valeurs du taux de prise de nutriments  $V_{MAX}$ . Le modèle de croissance utilisé correspond à un modèle de type Droop (Droop, 1974) dont les équations sont détaillées dans le chapitre 2 de ce mémoire. Pour ces expériences, on simule une colonne d'eau de 20m de profondeur avec une résolution  $\Delta z = 0.2\text{m}$  dans laquelle on génère un nombre  $N = 50$  particules par maille de grille. La concentration initiale en phytoplancton est de  $0.002 \text{ mol C m}^{-3}$ . On considère un profil de nutriments initialement uniforme sur toute la colonne d'eau de  $5 \times 10^{-4} \text{ mol C m}^{-3}$  ainsi qu'un coefficient de demi-saturation de  $2.14 \times 10^{-4} \text{ mol C m}^{-3}$ . Le taux de croissance est  $\mu_{MAX} = 1 \text{ j}^{-1}$ . Le profil de lumière est constant sur toute la colonne d'eau. Les résultats sont présentés dans les Figures 7 et 8 pour des taux  $V_{MAX}$  d'absorption de nutriments de respectivement 1 et  $0.1 \text{ mol N mol C}^{-1} \text{ j}^{-1}$ .

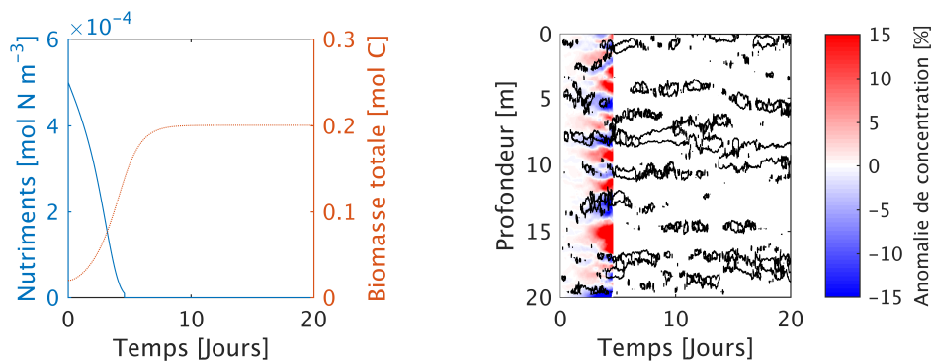


Figure 7: Gauche: évolution temporelle de la biomasse totale en phytoplancton (mol C) et de la moyenne de la concentration en nutriments (mol N m<sup>-3</sup>). Droite: anomalie de concentration en nutriments dans la colonne d'eau (% par rapport à la moyenne). Les contours noirs représentent des agrégats de phytoplancton.

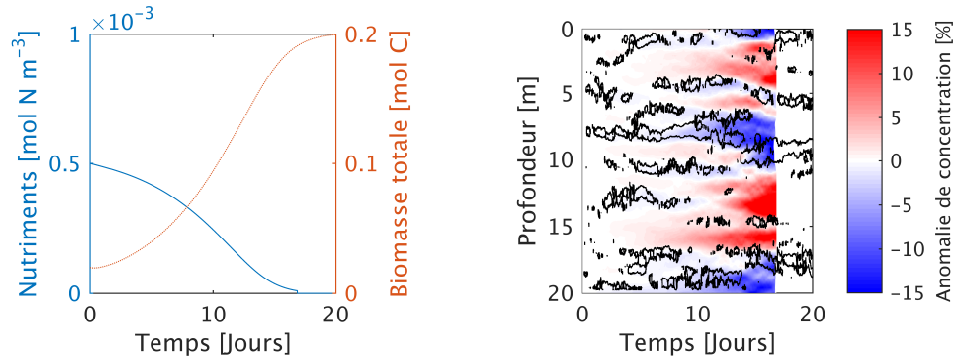


Figure 8: Gauche: évolution temporelle de la biomasse totale en phytoplancton (mol C) et de la moyenne de la concentration en nutriments (mol N m<sup>-3</sup>). Droite: Anomalie de concentration en nutriments dans la colonne d'eau (% par rapport à la moyenne). Les contours noirs représentent des agrégats de phytoplancton.

Pour les deux expériences, les profils de nutriments dans la colonne d'eau mettent en évidence la présence d'anomalies négatives de la concentration en nutriments corrélées avec la présence d'agrégats de phytoplancton. Ces anomalies s'accroissent à mesure que la biomasse en phytoplancton augmente et que les nutriments sont consommés. Pour un taux d'absorption rapide de nutriments (Figure 7), ces anomalies apparaissent dès les premiers jours de simulations jusqu'à ce que les nutriments soient entièrement consommés (~ 5j). Dans ce cas,  $T_B (= 1/\mu) > T_P$ , ainsi les processus biologiques qui tendent à accentuer les anomalies sont plus rapides que les processus de mélange qui visent à les estomper. Dans le cas d'un taux d'absorption plus faible (Figure 8), les anomalies mettent plus de temps à apparaître (~ 10j). Ceci provient du fait que les processus qui tendent à mélanger la colonne d'eau compensent presque les processus de croissance et d'absorption de nutriments qui tendent à accentuer les anomalies de concentrations ( $T_B \sim T_P$ ). Dans les deux cas, l'amplitude des anomalies reste toutefois relativement faible (15% de la moyenne) et peut être négligées si on augmente le nombre de particules générées dans modèle.

Cette étude préliminaire couplée avec d'autres études réalisées auparavant (Hunter et al., 1993; Visser, 1997; Ross and Sharples, 2004) nous permet de contraindre un peu plus

le comportement de l'algorithme de marche aléatoire dans le but d'établir un cadre pour la suite de cette étude.

## CHAPITRE II

### A LAGRANGIAN VERSUS EULERIAN MODEL COMPARISON OF PHYTOPLANKTON GROWTH

#### Résumé

Nous avons réalisé une comparaison entre les formulations Eulérienne et Lagrangienne d'un modèle 1D de croissance du phytoplancton sous différentes conditions de mélange. Le modèle simule la croissance en fonction de la lumière ainsi que de la concentration cellulaire en nutriments (cinétique de Droop). La principale différence entre les deux approches repose sur la façon dont le phytoplancton est traité. Dans le cadre Eulérien, la population à un temps et une profondeur donnés se trouve dans le même état physiologique approximé par la moyenne. En revanche dans l'approche Lagrangienne, on suit le devenir de chaque cellule individuellement. La population à une profondeur donnée est donc le résultat d'une multitude de traits physiologiques dus à différents historiques de vie. L'objectif de cette étude est de déterminer sous quelles conditions de mélange turbulent la prise en compte de l'historique de vie des individus produit des résultats significativement différents de l'approche traditionnelle Eulérienne. Deux principaux résultats émergent: (1) les deux formulations produisent les mêmes résultats dans le cas où la colonne d'eau est complètement homogène, peu importe le degré de turbulence et ;(2) dans le cas où la colonne d'eau est stratifiée, les résultats des deux approches divergent à mesure que le mélange turbulent augmente jusqu'à une valeur seuil à partir de laquelle le système devient homogène. Ces résultats suggèrent qu'en présence de forts gradients environnementaux et d'un fort mélange, le modèle Lagrangien donnera des résultats différents de son homologue Eulérien. Cela suggère aussi que les résultats différeront dans des conditions réalistes où l'intensité du mélange varie significativement dans l'espace et dans le temps au cours d'une saison.

## Abstract

Here we compared the results of the Eulerian (bulk properties) and Lagrangian (individual based) formulations of a simple 1D model of marine phytoplankton growth under different mixing conditions. The model simulates growth as a function of light and internal nutrient cell quota (Droop kinetics). The main discrepancy between the two approaches lies in the way phytoplankton is treated. In the Eulerian approach, the population at a given time and depth is in the same physiological state approximated by average properties. On the other hand, the Lagrangian formulation tracks each individual cell or cluster of cells. The population at a given location shows a range of many physiological traits due to different life histories. The aim of this study is to determine under which mixing condition, taking into account the cell's individual life history produces significantly different results from the traditional Eulerian approach. Two main outcomes appear: (1) the two formulations give same results when there is no environmental gradient for any level of turbulent mixing and; (2) in stratified conditions, results of the two approaches diverge as turbulence intensity increases up to a turbulence threshold value, at which the water column appears homogenized to moving cells. These results suggest that in case of strong environmental gradients and strong mixing such as frequently observed in natural systems, the Lagrangian approach will be more accurate than his Eulerian counterpart. It also suggests that results will differ in realistic conditions where spatial and temporal variability of turbulent mixing span many orders of magnitude.

## 2.1 Introduction

Biogeochemical modeling is widely used to study the behavior of marine ecosystems and plankton dynamics. It is recognized as a powerful tool to help understand the underlying processes of complex systems ([Arhonditsis and Brett, 2004](#)). Most of these models represent life processes as chemical reactions where state variables like phytoplankton are



described in terms of concentrations rather than individuals. In this approach, here referred to Eulerian approach (aka lumped models or population level model), population dynamics is formulated using the so-called reaction-advection-diffusion equations (Franks, 2002) based on average properties. Organisms are thus described as a continuum and variability among individuals is simply not accounted for. However a phytoplankton population at a given time and location in its natural environment is composed by many individuals in different physiological states (Ross et al., 2011). This apparent intrapopulation variability results amongst other causes, from the different life histories of individuals. In a turbulent environment, cells are randomly transported in the water column and experience different light and nutrient conditions. They are also able to adapt their physiology to this changing environment on time scales of less than one hours to several hours (Cullen and Lewis, 1988). The way in which a particular organism reacts to its environment is thus intrinsically related to its trajectory in the water column, which determines its exposure to light and nutrients, and differs among individuals. Processes involved in the physiological response of organisms to their environment like those governing photosynthesis (e.g, photoinhibition and photoacclimation), nutrient uptake or respiration then received a great attention. Mechanistically more correct formulations of these processes that are intrinsically individual-based and fully non-linear are then emerging in models (Baklouti et al., 2006). For example, the classical Michaelis-Menten kinetic is gradually substituted by the so-called Droop kinetics (Droop, 1974), where growth is decoupled from nutrient uptake and based on internal N:C ratio rather than on external concentrations. Nevertheless, adding these new types of equations in the classical Eulerian paradigm can introduce some numerical errors (Woods and Onken, 1982; Broekhuizen et al., 2003; Schuler, 2005; Hellweger and Kianirad, 2007). The former authors argue that averaging non-linear functions before integrating them can lead to inaccuracies thanks to Jensen's inequality, which states that for concave functions, the mean value of the function is systematically less than the function of a mean value. A good example of this is given in Hellweger and Kianirad (2007). Consider two sub-populations with respectively N:C ratio  $Q_A = Q_0$  mol N mol C<sup>-1</sup> and  $Q_B = 3Q_0$  mol N mol C<sup>-1</sup>. The growth rate is calculated using a Droop-

type equation (Droop, 1974) of the form  $\mu = \mu_{\max} (1 - Q_0/Q)$ . In the Eulerian approach, the mean population-averaged cell quota is first calculated  $Q_{ave} = 2Q_0$  mol N mol C<sup>-1</sup> and the growth rate is then computed giving  $\mu = 0.5\mu_{\max}$ . On the other hand the growth rate could be first calculated for each sub-population  $\mu_A = 0$ ,  $\mu_B = 0.67\mu_{\max}$  and then averaged, resulting in  $\mu = 0.33\mu_{\max}$  which is clearly lower. Only the latter procedure is correct. These arguments motivated the development of alternative models, here referred to as Lagrangian models (or agent based or individual based models) where each individual member of a population is simulated. Within this formulation, individual cell locations and physiological states are tracked and population dynamics are seen as an emergent property of individual traits. Several studies attempted a comparison between Eulerian and Lagrangian formulations (Broekhuizen et al., 2003; Hellweger and Kianirad, 2007; Fredrick et al., 2013). For example, Hellweger and Kianirad (2007) studied a test case where a continuous phosphate point source is advected into a straight river channel. The results of this experiment were in agreement with the Jensen's inequality's argument and showed a difference of 30% in term of total biomass between both models. However, the role of turbulent mixing as the main factor for the establishment of intrapopulation variability is overlooked. To illustrate this, let us consider the non-realistic case in which there is no turbulence: all cells at a given location have the same life history, thus intrapopulation variability is minimized and dynamics can be accurately represented using the classical Eulerian formulation. On the other hand, in the case of strong mixing in shallow waters so that the water column is rapidly homogenized, gradients are minimized and all individuals have also the same life history and could also be adequately simulated using an Eulerian approach. Between these extremes, there exists a wide range of mixing conditions leading to different individual dynamics. The question addressed here is then: under what mixing condition is it important to take into account individual life history? In this paper we perform a comparison of Eulerian and Lagrangian models under different mixing conditions ranging from idealized cases to more realistic ones. Section 2 provides a complete description of the model. Results are presented in section 3 and discussed in section 4.

## 2.2 The physical environment

Our objective required that we conducted a step-by-step formulation of the problem by designing different mixing scenarios with increasing levels of realism. The first set of experiments uses uniform and homogeneous turbulence with different diffusivity values. In a second set of experiments, we use the  $K$ -profile parametrization (KPP) turbulence model (Large and McWilliams, 1994) together with the General Ocean Turbulence Model (GOTM, Umlauf and Burchard (2005)) to compute time-dependent mixing profiles created by surface wind stress and tidal mixing. Information on the experiments are given in Table 1.

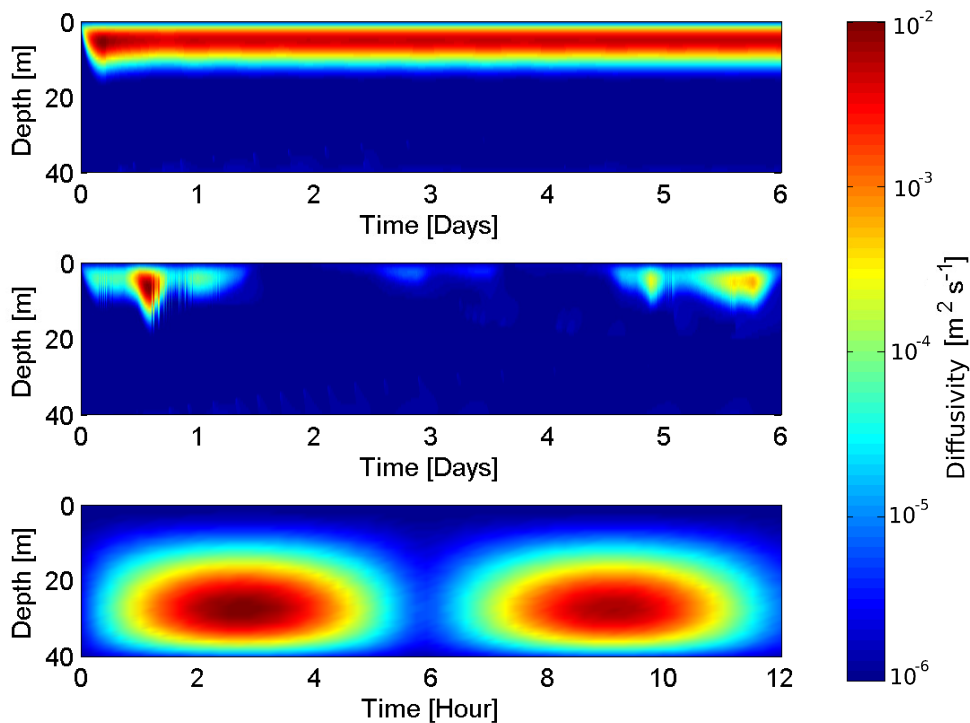


Figure 9: Mixing scenarios used in the second set of experiments. Top: constant wind scenario. Middle: variable wind scenario. Below: tidal mixing scenario calculated from a  $M_2$  tide period with mean current speed of  $0.5 \text{ m s}^{-1}$

Table 1: Description of numerical experiments.

experiment No	diffusivity type
1	uniform $K=1\times 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
2	uniform $K=1\times 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
3	uniform $K=1\times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
4	uniform $K=1\times 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
5	Constant wind $8 \text{ m s}^{-1}$
6	Variable wind
7	Tidal mixing

### 2.3 Biological model description

For the purpose of the study, the biological model is reduced to its simplest form in which growth is only formulated as a function of light and nutrient uptake using a Droop type model (Droop, 1974). Although this model is not state-of-the-art as it does not account for photo-acclimation and photo-inhibition (Ross and Geider, 2009), it contains the proper amount of complexity needed to capture the underlying mechanisms responsible of intrapopulation variability with regards to nutrient uptake dynamics in the presence of vertical nutrient gradients. This section presents all the state equations used in the Eulerian and Lagrangian simulations.

#### 2.3.1 Light

Here we consider a surface irradiance value at noon of  $1200 \mu\text{E m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ , varying according to a semi-sinusoidal signal of day length 16h, corresponding to day length at mid-

latitude during summer. Irradiance then decreases exponentially with depth according to:

$$I(z) = I_0 \exp(-k_{bg}z) \quad (2.1)$$

where  $I_0$  is the surface irradiance and  $k_{bg}$  the light attenuation constant ( $\text{m}^{-1}$ ). The light-dependent production is modelled using a saturating response curve

$$P_1 = 1 - \exp\left(-\frac{I}{I_s}\right) \quad (2.2)$$

with  $I_s$  the saturation onset constant ( $\mu\text{E m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ).

### 2.3.2 Photosynthesis

The photosynthesis is formulated using a Droop type cell quota (Droop, 1974) equation simplified to account for a single nutrient limitation:

$$\mu_P = \begin{cases} P_1 \left[ \mu_{P,MAX} \left( 1 - \frac{Q_{min}}{Q} \right) \right] & \text{if } Q > Q_{min} \\ 0 & \text{if } Q \leq Q_{min} \end{cases} \quad (2.3)$$

Where  $\mu_{P,MAX}$  is the maximum specific photosynthesis rate ( $\text{day}^{-1}$ ),  $Q_{min}$  the subsistence cell quota ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$ ) and  $Q$  is the nutrient cell quota ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$ ). If  $Q \leq Q_{min}$  then  $\mu_P = 0$  and if neither nutrients nor light are limiting ( $Q = Q_{max}$ ) then  $\mu_P = 1 - \frac{Q_{min}}{Q_{max}} \mu_{P,MAX} = 0.8 \mu_{P,MAX}$  pour  $Q_{min} = 0.05 \text{ mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$  et  $Q_{max} = 0.25 \text{ mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$

### 2.3.3 Phytoplankton mass balance

In the Eulerian model, change in phytoplankton concentration can be expressed as:

$$\frac{dP_E}{dt} = \mu_G P_E \quad (2.4)$$

where  $\mu_G$  is the specific growth rate ( $\text{day}^{-1}$ ) defined as  $\mu_G = \mu_P - \mu_R$  where  $\mu_P$  is the specific photosynthesis rate ( $\text{day}^{-1}$ ) and  $\mu_R$  the respiration rate ( $\text{day}^{-1}$ ). In the Lagrangian model, the mass balance for phytoplankton is:

$$\frac{dP_L}{dt} = \frac{1}{v_z} \sum_{\text{agents}} \mu_G m \quad (2.5)$$

Where  $P_L$  is the phytoplankton biomass per unit volume ( $\text{mol C m}^{-3}$ ),  $v_z$  is the volume of water in a grid cell of vertical size  $\Delta z$  and  $1\text{m}^2$  of horizontal area and  $m$  is the biomass ( $\text{mol C}$ ) carried by each particle.

### 2.3.4 Nutrient uptake

Following [Ross and Sharples \(2007\)](#), uptake of nitrate  $\text{NO}_3$  is expressed using a Michaelis-Menten type function:

$$V = V_{\max} \left( 1 - \frac{Q}{Q_{\max}} \right) \frac{\text{NO}_3}{k_N + \text{NO}_3} \quad (2.6)$$

where  $V$  is the specific uptake rate ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1} \text{day}^{-1}$ ),  $V_{\max}$  the maximum specific uptake rate ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1} \text{day}^{-1}$ ),  $Q$  the intracellular nutrient content ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$ ),  $Q_{\max}$  the maximum storage quota ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1}$ ) and  $k_N$  the nutrient half-saturation constant ( $\text{mol NO}_3 \text{ m}^{-3}$ ).

Change in external nutrient concentration is described in the Eulerian model by:

$$\frac{d\text{NO}_3}{dt} = (W - V)P_E \quad (2.7)$$

where  $P_E$  is phytoplankton concentration,  $W = k_W Q$  is the excretion rate ( $\text{mol NO}_3 \text{ mol C}^{-1} \text{day}^{-1}$ ) which is a function of the intracellular nutrient content with  $k_W$  the excretion constant ( $\text{day}^{-1}$ ).

Extracellular nutrient concentration in the Lagrangian model change according to:

$$\frac{dNO_3}{dt} = \frac{1}{v_z} \sum_{\text{agents}} (W - V)m \quad (2.8)$$

Change in intracellular nutrient content through uptake, excretion and growth can be expressed as

$$\frac{dQ}{dt} = V - W - \mu_G Q \quad (2.9)$$

### 2.3.5 Transport

The fundamental difference between the lumped Eulerian paradigm and its Lagrangian counterpart lies on the way the transport is treated. In an Eulerian model, the transport of quantities such as phytoplankton and nutrients is computed using conventional advection-diffusion equations :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left( K \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{diffusion}} \overbrace{-\nu \frac{\partial C}{\partial z}}^{\text{sinking}} \quad (2.10)$$

where  $C$  is substituted by  $P_E, NO_3$  ( $\text{mol m}^{-3}$ ),  $K$  is the diffusivity and  $\nu$  the sinking velocity ( $\text{m s}^{-1}$ ). Note that for  $NO_3$  there is no sinking velocity, thus  $\nu = 0$ . The evolution of the intracellular nutrient content  $Q$  expressed in  $\text{mol } NO_3 \text{ mol } C^{-1}$  is calculated only after it has been converted in  $\text{mol } NO_3 \text{ m}^{-3}$  through  $Q_E = QP_E$ .

In the Lagrangian model, the transport of particles within a turbulent field is described using a random walk algorithm (Hunter et al., 1993; Visser, 1997; Ross and Sharples, 2004) where

the position of each particle  $z_{n+1}$  is related to its previous position  $z_n$  according to:

$$z_{n+1} = z_n - \underbrace{v\Delta t}_{\text{sinking}} + \underbrace{K'(z_n)\Delta t}_{\text{deterministic term}} + \underbrace{R \left[ \frac{2K \left( z_n + \frac{1}{2} K'(z_n) \Delta t \right) \Delta t}{r} \right]^{1/2}}_{\text{random term}} \quad (2.11)$$

where  $z_{n+1}$  and  $z_n$  denote the vertical position of a particle respectively at time  $n + 1$  and  $n$ .  $K' = \partial K / \partial z$  Each particle moves randomly upward or downward at each time step  $\Delta t$  depending of  $R$  which is a random process of zero mean and variance  $r$ . The amplitude of the displacement depends on the value of the diffusivity  $K$ . Boundary conditions are set to satisfy:

$$z_{n+1} = \begin{cases} -z_{n+1} & \text{if } z_{n+1} < 0 \\ 2H - z_{n+1} & \text{if } z_{n+1} > H \end{cases} \quad (2.12)$$

where  $H$  is the water column depth (m).

### 2.3.6 numerical aspects and stability

A major inconvenient in Lagrangian simulations arises from the choice of the number of particles generated in the model as simulating a large number of particles could be computationally expensive. On the contrary, an insufficient number of particles induces noisy phytoplankton concentration profiles which could impact the accuracy of the results. The value of the time step  $\Delta t$  and the grid resolution  $\Delta z$  must also be chosen so that stability criteria are met. For Eulerian calculations, the first stability criterion is given by the Courant-



Table 2: Model parameters. All parameters are chosen to be typical values and thus not attached to a specific phytoplankton species. Conditions are set to represent a coastal area during summer. Sources: 1:Broekhuizen (1999), 2:Dortch and Maske (1982), 3:Sharples (1999), 4:Brand and Guillard (1999).

Symbol	Description	Value	Unit	Source
$V_{max}$	Maximum uptake rate	0.8	mol NO <sub>3</sub> mol C <sup>-1</sup> day <sup>-1</sup>	2
$k_N$	Half saturation constant	$2.14 \times 10^{-4}$	mol NO <sub>3</sub> m <sup>-3</sup>	1
$k_W$	Excretion rate	0.1	day <sup>-1</sup>	
$\mu_R$	Respiration rate	0.1	day <sup>-1</sup>	3
$\mu_{P,MAX}$	Maximum photosynthesis rate	2.0	day <sup>-1</sup>	2
$Q_{min}$	Subsistence cell quota	0.05	mol NO <sub>3</sub> mol C <sup>-1</sup>	1
$Q_{max}$	Maximum storage quota	0.25	mol NO <sub>3</sub> mol C <sup>-1</sup>	1
$\Delta z$	Resolution of the grid	0.5	m	-
$\Delta t$	Time step	6.0	s	-
$\nu$	Settling velocity	$2.3148 \times 10^{-6}$	m s <sup>-1</sup>	-
$H$	Depth of the water column	40	m	-
$I_s$	Saturation onset constant	50	$\mu\text{E m}^{-2} \text{s}^{-1}$	4
$k_{bg}$	Light attenuation constant	0.3	m <sup>-1</sup>	-
$N_0$	Initial nutrient concentration	$5 \times 10^{-3}$	mol NO <sub>3</sub> m <sup>-3</sup>	-
$m_0$	Initial biomass per particle	40	mol C	-
$Q_0$	Initial cell quota	0.15	mol NO <sub>3</sub> mol C <sup>-1</sup>	-

Friedrich-Levy number given by:

$$CFL = \frac{K\Delta t}{\Delta z^2} \leq 1 \quad (2.13)$$

For Lagrangian simulations, a correct use of the random walk requires that the diffusivity profile is both continuous and differentiable which lead to a second criterion Ross and Sharples (2004)

$$\Delta t \ll \text{MIN} \left( \frac{1}{|K''|} \right) \quad (2.14)$$

For all simulations a time step  $\Delta t = 6\text{s}$  and a resolution  $\Delta z = 0.5\text{m}$  were sufficient to meet the first criterion. For simulations with variable mixing, diffusivity profiles have been computed with a  $1\text{m}$  grid resolution with GOTM and re-interpolated on the model grid, insuring that

diffusivity profile is sufficiently smooth to meet the second criterion. We also generated a number  $N = 20000$  particles, which has been found to be sufficient to avoid numerical noise in Lagrangian phytoplankton concentration profiles.

### 2.3.7 Model verification

The purpose of this study being to evaluate the discrepancy between the Eulerian and Lagrangian formulations induced by different life history of cells, the two models should produce the same results in the case where there is no variability among individuals. For this, we simulated a 1m water column with constant light such as  $P_I = 1$  and a high constant diffusivity  $K = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ensuring the domain is well-mixed. 20000 particles representing an initial concentration of  $0.002 \text{ mol C m}^{-3}$  were uniformly distributed. Initial nutrient concentration was  $5 \times 10^{-3} \text{ mol m}^{-3}$ . Both Eulerian and Lagrangian simulations produced exactly the same results, which is in agreement with our hypothesis (Figure 10).

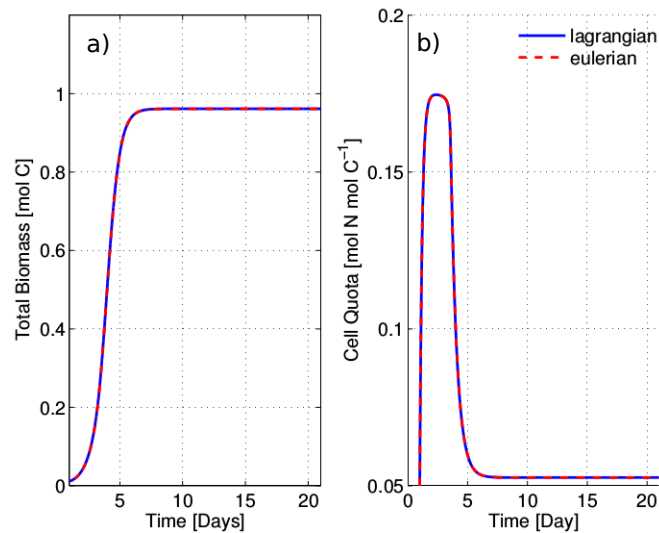


Figure 10: Validation experiment simulating a well mixed water column with neither light nor nutrient gradients. a) Evolution of the total biomass in the water column. b) Evolution of the mean cell quota N:C,  $Q$ .

## 2.4 Results

### 2.4.1 Cell quota

Snapshots of mean cell quotas after 10 days are presented in Figure 11 for scenarios 1-4 (Table 1). Due to the consumption of nutrients in the photic zone by photosynthesis, a gradient in the distribution of cell quotas appears. Note that the Lagrangian profile is noisy, which is due to the stochasticity introduced by the random walk. After having consumed all external nutrients, phytoplankton cells near the surface used all the internal content until they reached the subsistence quota  $Q_{\min}$ . At depth, phytoplankton cells took external nutrient until they reached the maximum storage quota  $Q_{\max}$  without using it for photosynthesis because of the absence of light. This represents a difference in terms of physiological state among the cells in the water column. Because cells at the surface have consumed nutrient for growth (Figure 12), the Lagrangian particles contain a greater amount of cellular carbon but a lower N:C ratio than particles at depth. As turbulent diffusivity increases, this gradient in Lagrangian simulations tends to disappear. Clearly, this is a direct consequence of intrapopulation heterogeneity. Population at each depth is composed by a crowd of individuals coming from different depth. As mixing increases, a larger fraction of cells coming from the deeper part of the water column where the nutrients are in replete condition are mixed up with those near the surface, contributing to increase the mean cell quota in the upper part of the water column. The same process takes place at depth where cells coming from the upper part are mixed with those from the bottom, leading to a decrease of the mean cell quota in the lower part of the water column. Comparatively, cell quota gradients in Eulerian simulations follow the same profile of its Lagrangian counterpart and no evident difference is noted.

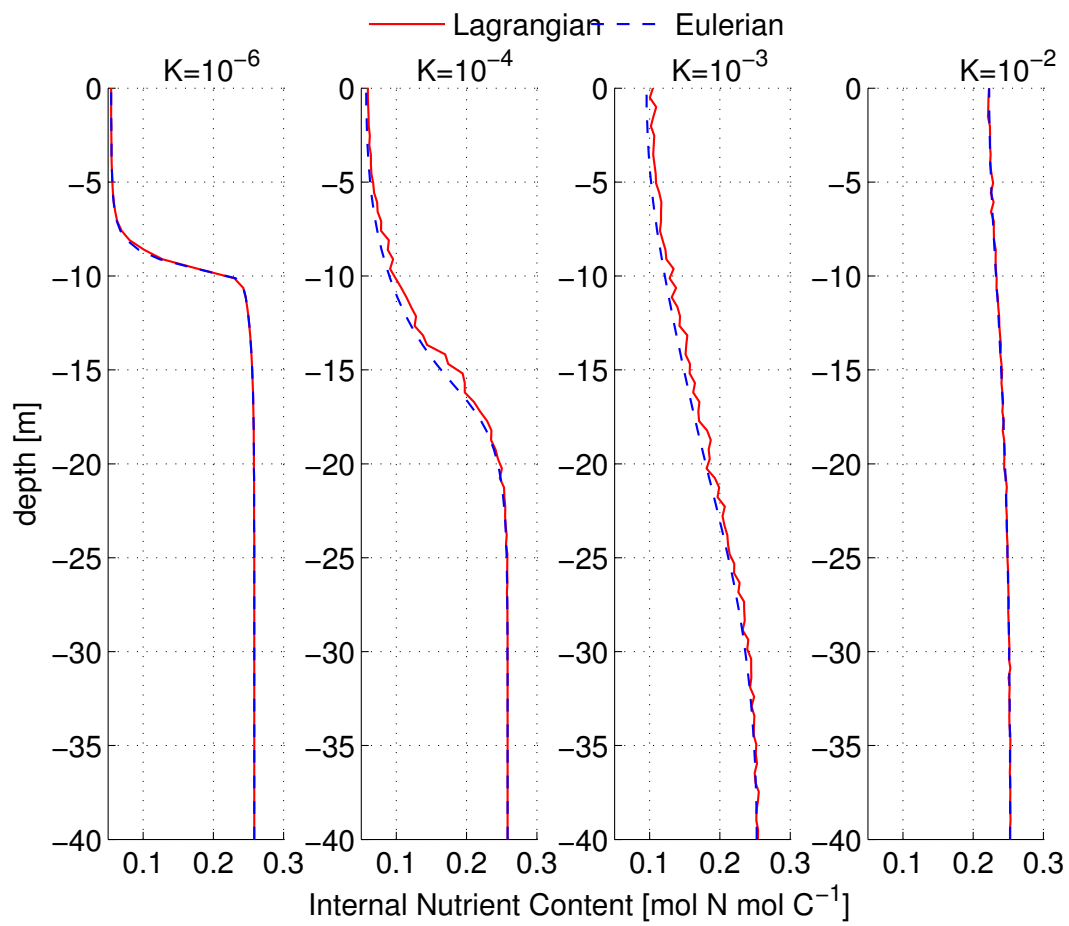


Figure 11: Instantaneous mean cell quota  $Q$  profile after 10 days for Eulerian and Lagrangian simulations.

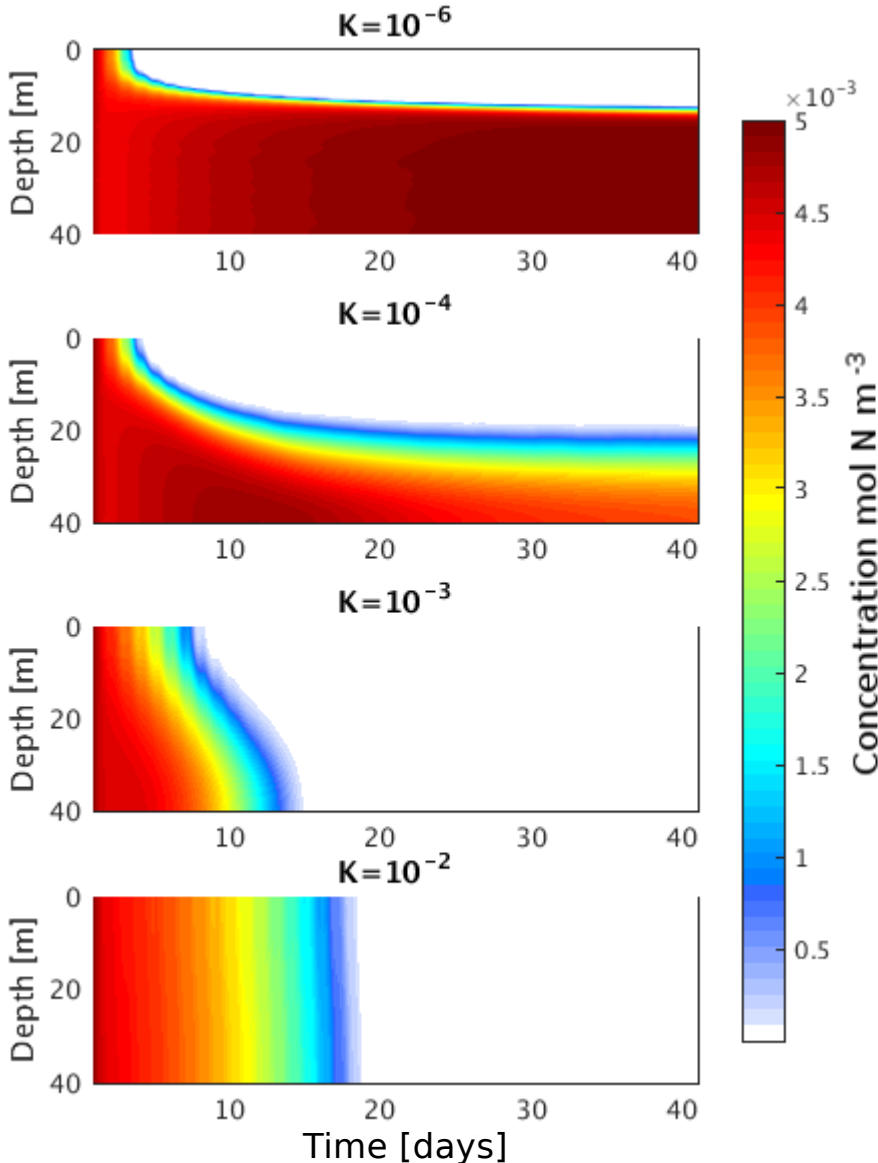


Figure 12: Profile of external nutrient concentrations in mol NO<sub>3</sub> m<sup>-3</sup> for scenarios 1-4.

### 2.4.2 Growth rate

As phytoplankton consume nutrients through growth and photosynthesis, a nutrient-depleted condition appears rapidly in the upper layer of the water column contributing to

limit growth rate near the surface at the end of the simulation. In the lower part of the water column, light becomes limiting, preventing phytoplankton to grow. The resulting growth rate from nutrient limitation near the surface and light limitation at depth exhibits a maximum at the bottom of the nitracline (Figure 13). As mixing increases, nutrients from the deep layer contribute to refill the upper part of the water column and sustain growth resulting in a maximum growth rate near the surface. The Eulerian formulation slightly over-estimates the growth rate compared to the Lagrangian. Figure 14 shows the repartition of cell quotas and growth rates of all cells at 5m depth after 10 days. Even if mean cell quotas for Eulerian and Lagrangian simulations are similar, cells quota are widespread. As an illustration of the Jensen inequality, the resulting average growth rate in Lagrangian simulation is always lower than in the Eulerian.

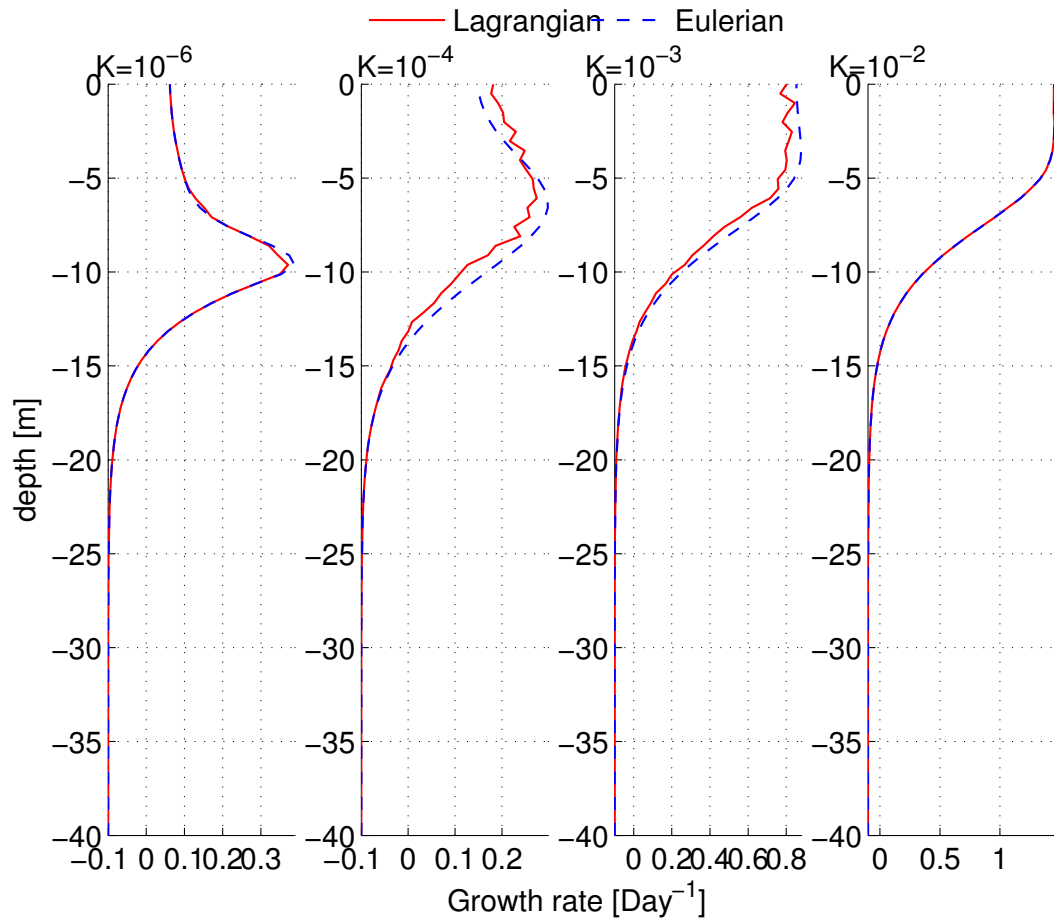


Figure 13: Instantaneous mean growth rate  $\mu_g$  profile after 10 days for Eulerian and Lagrangian simulations.

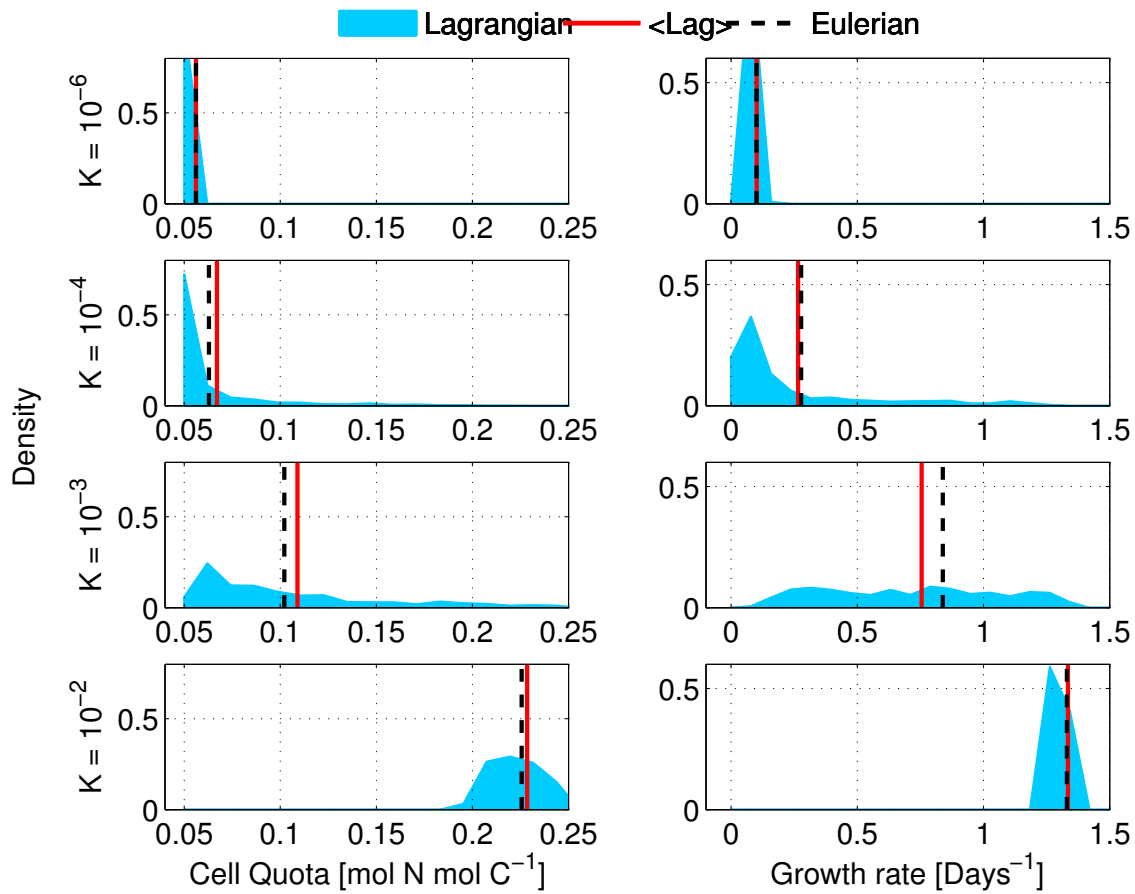


Figure 14: Left: intrapopulation distribution of cell quotas in the Lagrangian model at  $t=10$  days and  $z= -5\text{m}$  for scenarios 1-4. Right: intrapopulation distribution of growth rate in the Lagrangian model at  $t=10$  days and  $z= -5\text{m}$  for scenarios 1-4. (see Table 1 for the description of the experiment)

To better understand the relation between intrapopulation variability and the error made in Eulerian simulations, snapshots of the repartition of cell quotas and growth rate of all cells at 5m for scenario 3 are shown in Figure 15 at different moments of the simulation. Growth rate profiles and cell quota profiles for Eulerian and Lagrangian simulations are also shown in Figure 16. At the beginning of the simulation, nutrients are in replete conditions and all cells have cell quotas close to  $Q_{\max}$ . The resulting growth rate shows no differences between Eulerian and Lagrangian simulations. When external nutrients start to be limiting,



mean cell quotas decrease but high turbulence increases the contribution of cells coming from depth with high cell quota. Cell quotas are thus widely distributed. Because of the Jensen's inequality, Eulerian simulation overestimates the growth rate. At the end of the simulation, the water column tends to be homogenized and cell quotas are close to  $Q_{\min}$ .

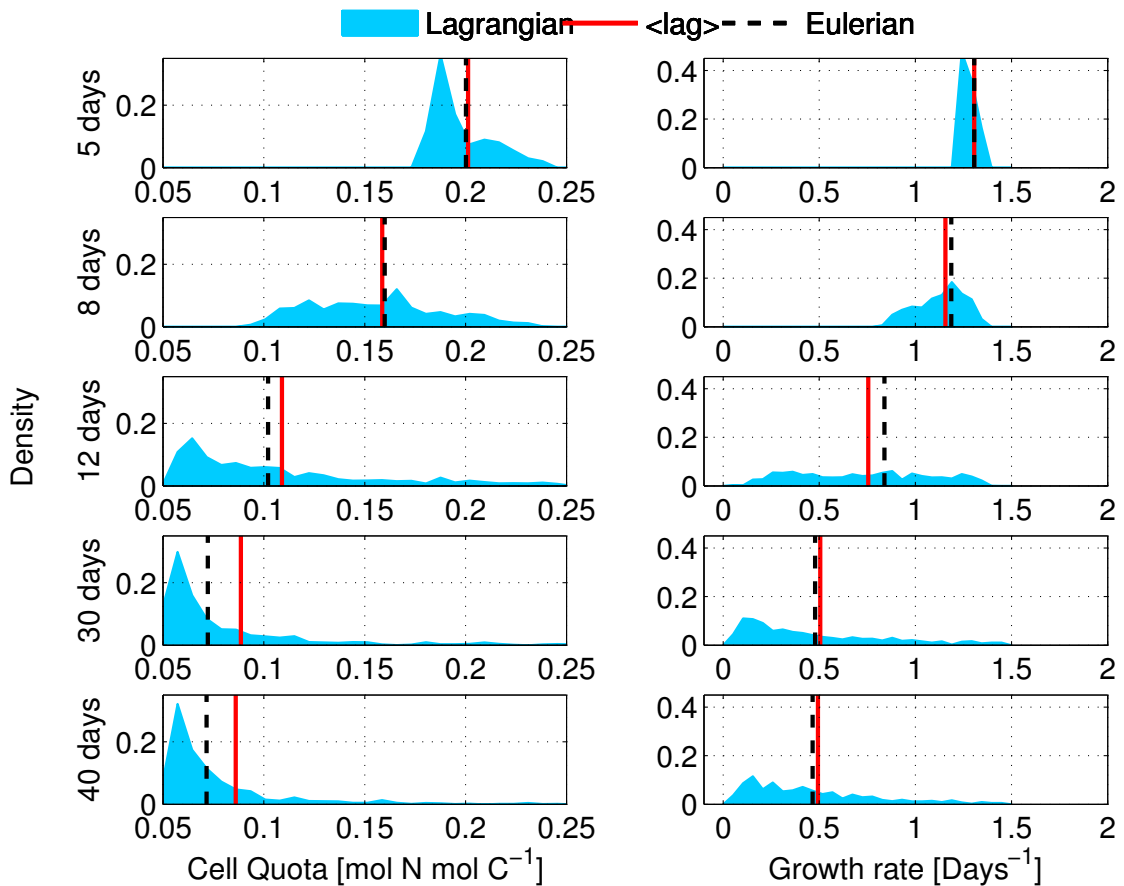


Figure 15: Left: intrapopulation distribution of cell quotas in the Lagrangian model at days and  $z = -5\text{m}$  for scenario 3. Right: intrapopulation distribution of growth rate in the Lagrangian model at 5,8,12,30 40 days and  $z = -5\text{m}$  for experiment 3. (see Table 1 for the description of the experiment)

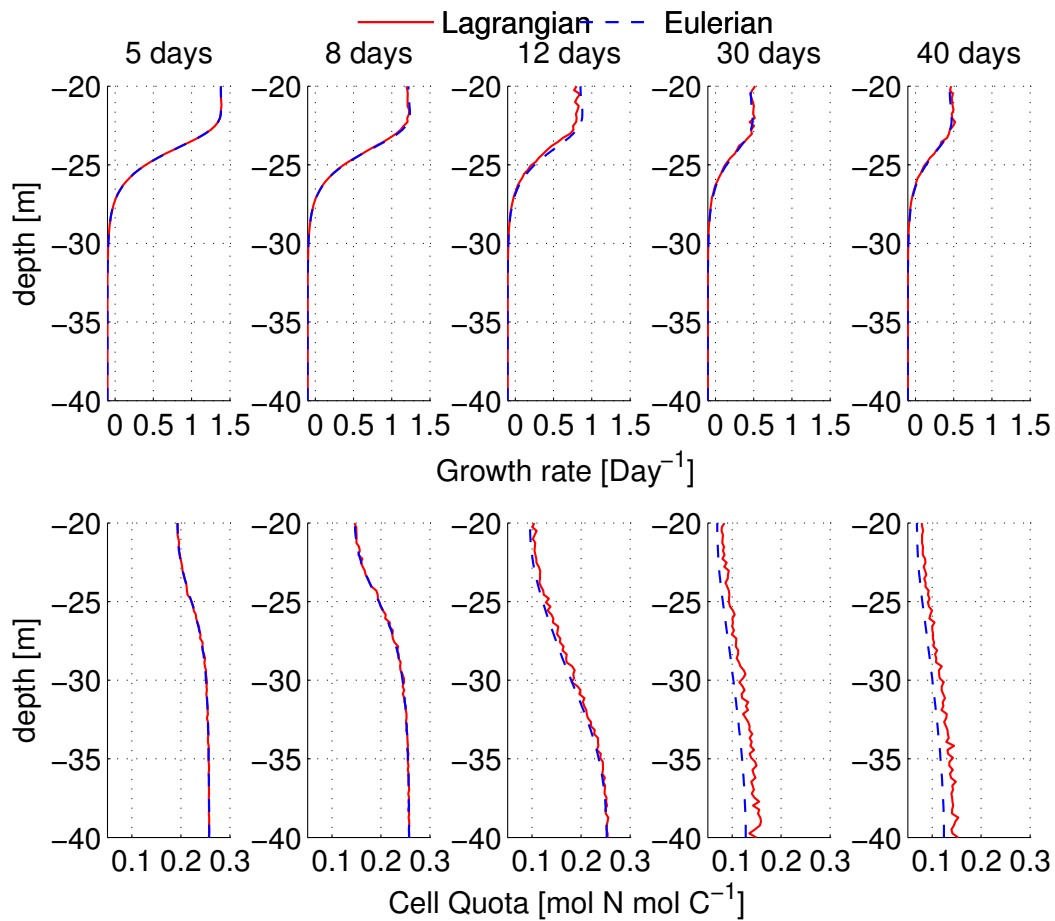


Figure 16: Top: instantaneous mean growth rate  $\mu_g$  profile at 5,8,12,30,40 days for Eulerian and Lagrangian simulations. Bottom: instantaneous mean cell quota  $Q$  profile after 5, 8, 12, 30, 40 days for Eulerian and Lagrangian simulations.

### 2.4.3 Total biomass

The total biomass for scenarios 1-4 is shown in Figure 17. Increased mixing enables to partially replete surface water with nutrients leading to an increase in total biomass in both Eulerian and Lagrangian simulations. Maximum differences between Eulerian and Lagrangian appears at intermediate turbulence values. In order to estimate the differences between the two formulations in term of total biomass, we calculated the normalized root mean

square error (NRMSE) between Eulerian and Lagrangian formulations for all simulations.

$$\text{NRMSE}(t) = \left[ \frac{(B_L(t) - B_E(t))^2}{B_E(t)^2} \right]^{1/2} \times 100\% \quad (2.15)$$

where  $B_E(t)$  and  $B_L(t)$  are the total biomass as a function of time in the Eulerian and Lagrangian simulations, respectively. Results are shown in Figure 18 for the 7 experiments. In realistic mixing conditions, such as variable tidal mixing, difference between Eulerian and Lagrangian formulations can reach as much as 10 % of the total biomass.

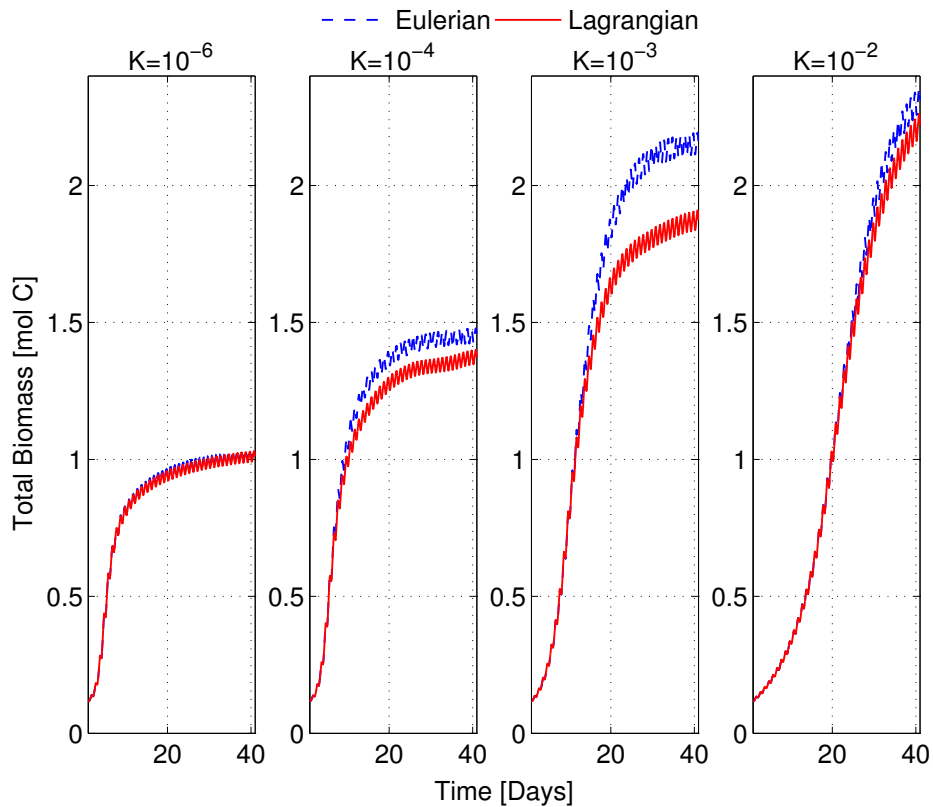


Figure 17: Eulerian and Lagrangian simulation of the total biomass for scenarios 1-4. See Table 1 for description of experiments.

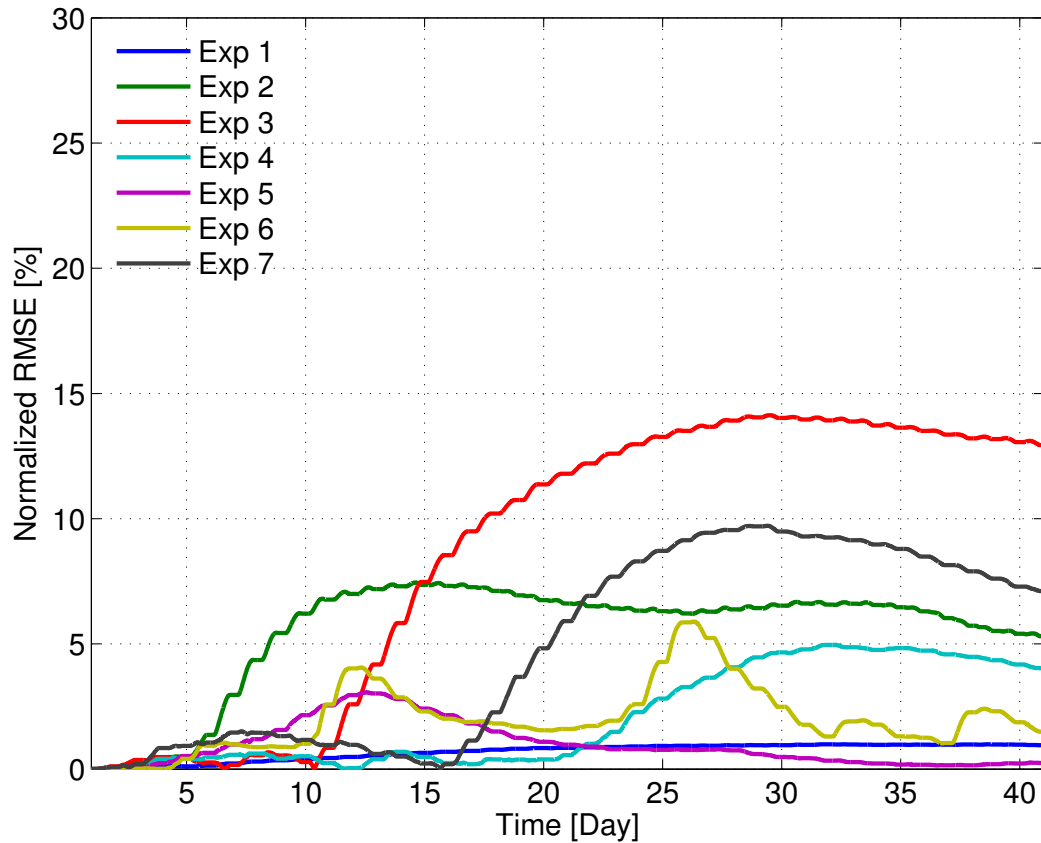


Figure 18: Root-Mean-Square error of the total biomass between Lagrangian and Eulerian simulations for different mixing scenarios. See Table 1 for description of scenarios.

#### 2.4.4 sensitivity analysis

In this section we extend the previous results by investigating the model behaviour in the parameter space. As in the previous section, we analyse here the temporal evolution of the error (in term of biomass) between the Eulerian and Lagrangian formulations by varying both biological and physical parameters values.

### 2.4.4.1 Model sensitivity to biological parameters

The value of phytoplankton growth parameters (i.e, the maximum storage quota  $Q_{max}$ , the maximum uptake rate  $V_{max}$  and the maximum photosynthesis rate  $\mu_{P,MAX}$ ) can vary significantly among species and environmental conditions (i.e, polar versus temperate environments). We thus investigate how different values of those parameters affect the results shown previous sections. For each parameter, we conducted a set of 20 simulations (5 parameter values for each of the 4 mixing scenarios with constant diffusivity  $10^{-6} - 10^{-2}$ ). The other parameters remain unchanged (see table 2). Results for the maximum storage quota  $Q_{max}$  are presented in Figure 19. The error in biomass between Eulerian and Lagrangian simulations is greatly affected by the value of  $Q_{max}$ . For each mixing scenario and particularly for intermediate turbulence (panels 2 and 3), this error increases proportionally with the increase in  $Q_{max}$ . This result is consistent with the Jensen's inequality: the higher is the value of  $Q_{max}$ , the larger is the range of internal nutrient content that a single cell can carry. The intrapopulation heterogeneity thus increases, which leads to an increase of the error. On the contrary the value of the maximum nutrient uptake rate  $V_{max}$  seems to have no notable effect on the magnitude of the error between Eulerian and Lagrangian formulations (Figure 20).

In order to investigate the effect of the maximum growth rate, we choose values ranging from  $0.5\text{d}^{-1}$  to  $2.5\text{d}^{-1}$ . This parameter is the most likely to differ between species and environmental conditions. Results are presented in Figure 21. Clearly, this parameter impact significantly the previous results both on the magnitude of the error and on the time at which the two formulations start to diverge. These results highlight the relationship between the growth rate and the mixing rate. Let  $\tau = \Delta z^2/K$  being the mixing time, i.e the time taken by a cell to travel through a distance  $\Delta z$ . If  $\tau \gg 1/\mu_{max}$ , cells are transported from the surface to the bottom more rapidly that they can divide. The total biomass remains low and thus the error between the two formulations is minimized. If  $\tau < 1/\mu_{max}$ , cells divide rapidly and the intrapopulation heterogeneity due to mixing is thus minimized. The error reach rapidly a maximum before it starts to decrease. Then this is in the case where  $\tau \sim 1/\mu_{max}$ , that the

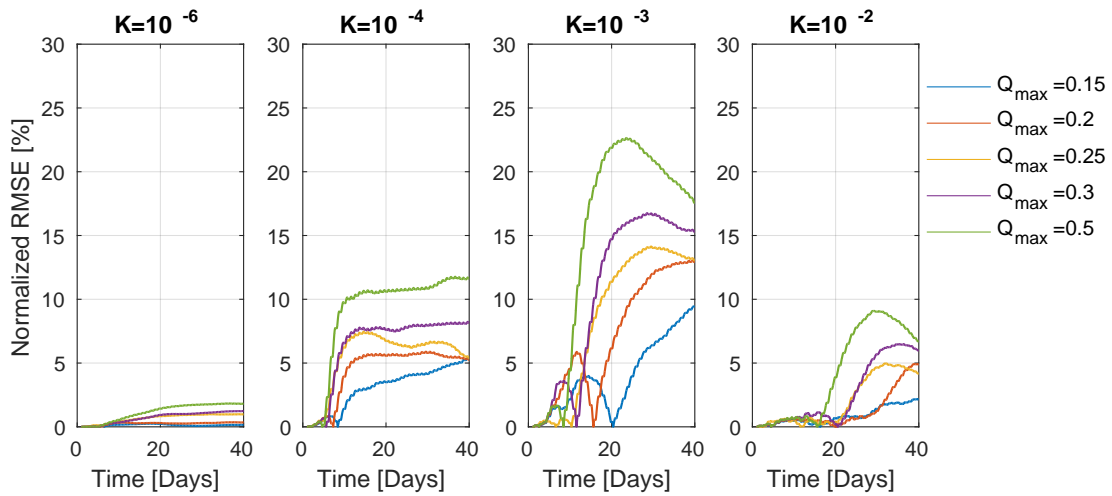


Figure 19: Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) and maximum storage quota  $Q_{MAX}$  of 0.15, 0.2, 0.25, 0.3 and 0.5 mol  $\text{NO}_3$  mol  $\text{C}^{-1}$ .

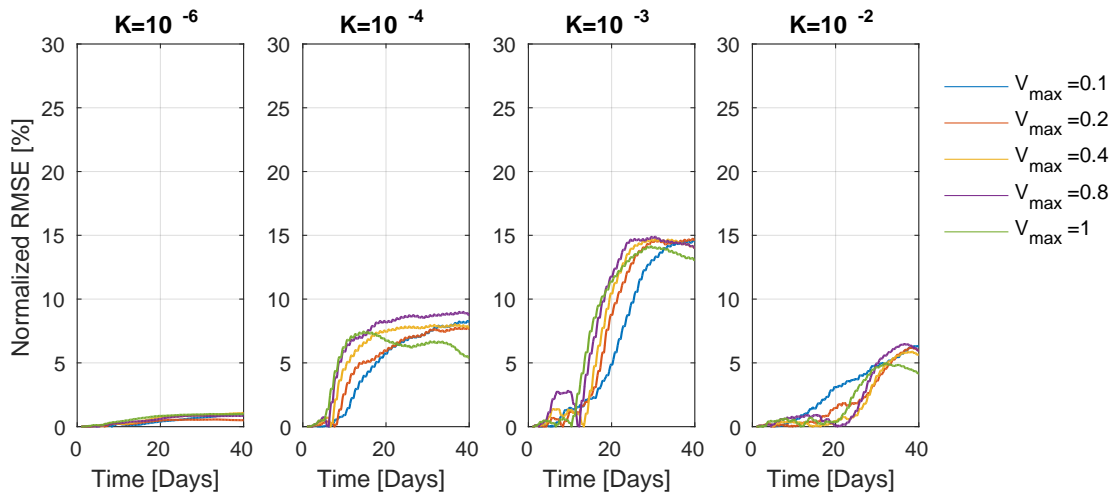


Figure 20: Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) and nutrient uptake rate  $V_{MAX}$  of 0.1, 0.2, 0.4 and 0.8 mol  $\text{NO}_3$  mol  $\text{C}^{-1} \text{d}^{-1}$ .

error is more likely to be important.

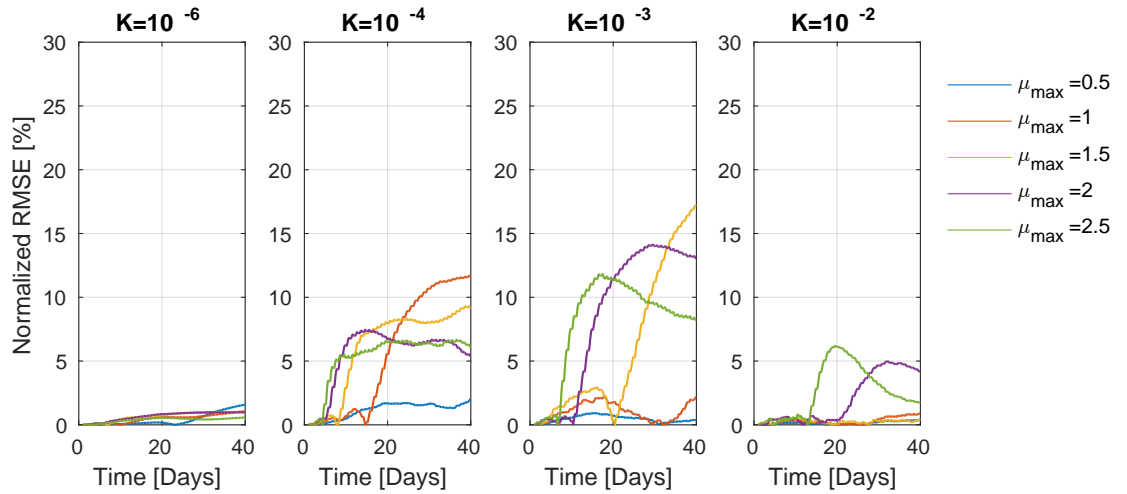


Figure 21: Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) and maximum growth rate  $\mu_{max}$  of 0.5, 1, 1.5, 2 and  $2.5 \text{d}^{-1}$ .

#### 2.4.4.2 Model sensitivity to nutrient input and depth

Since the discrepancy between the two formulations is directly constrained by the presence of environmental gradients, we also investigate how the depth of the water column and the initial nutrient concentration affects the previous results. For this analysis, 5 values of depth ranging from very shallow waters (10-20m) to deeper waters (100-200m) have been chosen. Results are presented in Figure 22. For very shallow waters (10m), the error between Eulerian and Lagrangian simulations is almost null. In that case, the water column is shallower than the photic zone ( $\sim 11 \text{m}$ ) leading to an equivalent consumption of  $\text{NO}_3$  between the surface and the bottom (no gradient). For 20m depth and intermediate diffusivity (panel 3), the error increases during the first days of the simulations and decreases rapidly after the water column have been completely homogenized due to mixing. For deeper waters, the error sensibly behaves in a similar fashion.

Five values for the initial nutrient concentration ranging from oligotrophic conditions ( $10^{-4} - 10^{-3} \text{mol NO}_3 \text{m}^{-3}$ ) to eutrophic conditions ( $10^{-2} \text{mol NO}_3 \text{m}^{-3}$ ) have also been chosen.

We recall here that the half-saturation constant for nutrient uptake is  $k_N = 2.14 \times 10^{-04}$  mol  $\text{NO}_3 \text{ m}^{-3}$ . As we can expect, varying the initial nutrient concentration mainly affects the moment at which the results from the two formulations start to diverge, which corresponds to the time needed to produce a gradient due to nitrate consumption near the surface (Figure 23). For oligotrophic conditions, the gradient appears rapidly between the surface and the bottom, which leads to an increase of the error since the very beginning of the simulation. However, for eutrophic conditions, the error starts to increase only after 15 or 20 days.

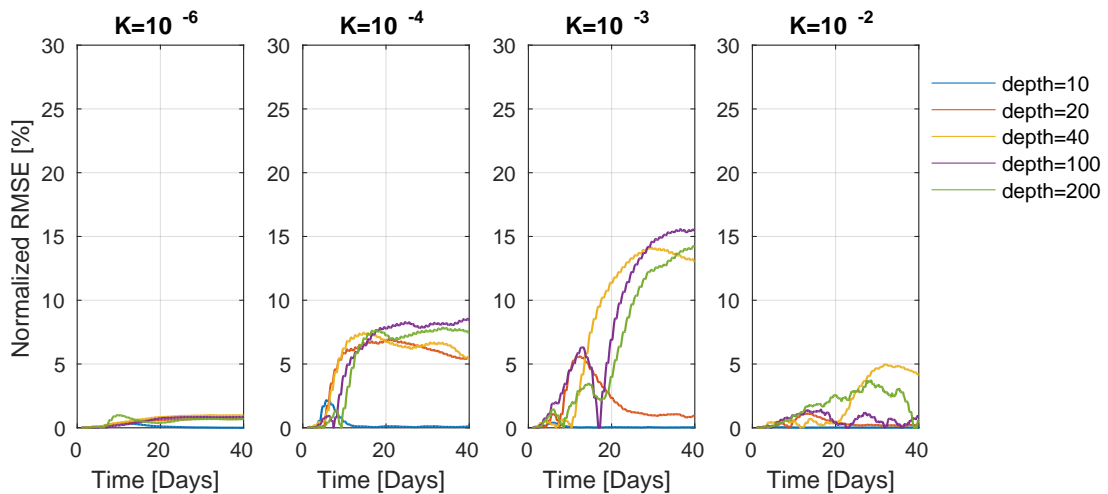


Figure 22: Root-Mean-Square error of the total biomass when comparing Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) and a depth of 10,20,40,100 and 200m.



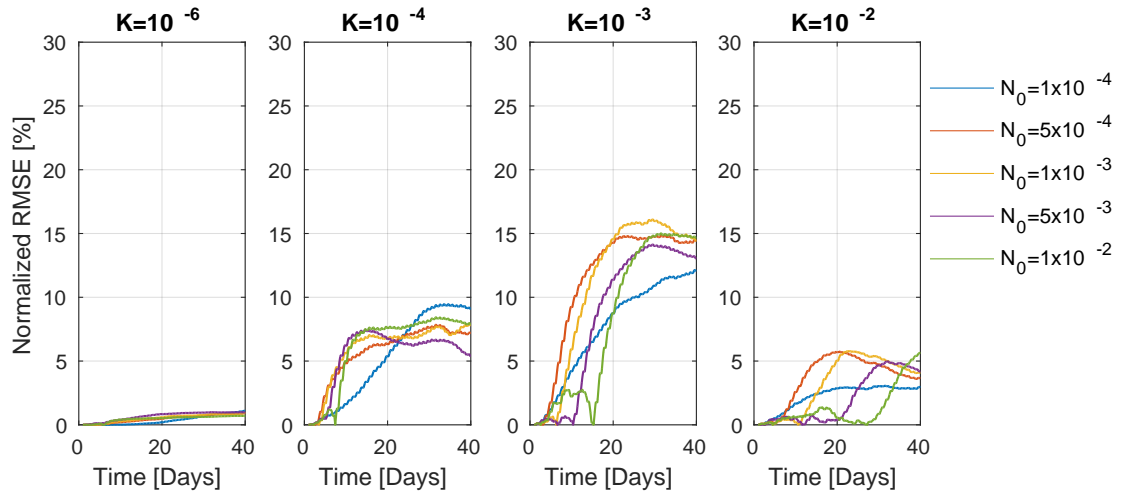


Figure 23: Root-Mean-Square error of the total biomass between Lagrangian and Eulerian simulations for scenarios with uniform/constant diffusivity ( $K = 10^{-6} - 10^{-2} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) and initial nutrients concentrations of  $10^{-4}$ ,  $5 \cdot 10^{-4}$ ,  $10^{-3}$ ,  $5 \cdot 10^{-3}$  and  $10^{-2}$   $\text{mol NO}_3 \text{m}^{-3}$ .

## 2.5 Discussion

This study was greatly inspired by that of [Hellweger and Kianirad \(2007\)](#) which highlighted the differences in the results between Lagrangian and Eulerian formulations for a simple phytoplankton model under realistic conditions. To go a step further in this exploration, we addressed here the question of the role of turbulent mixing for the establishment of intrapopulation variability and determine how vertical mixing conditions modulate the magnitude of the error between the two formulations. A set of experiments with idealized constant diffusivity profiles were first applied to explore the underlying processes of the relations between turbulent mixing and variability among individuals induced by different life histories. A second set with more realistic mixing scenarios, including mixing induced by surface wind stress and tidal mixing were then explored. In several cases, the Eulerian and Lagrangian simulations of the same biological model produced significantly different results

(> 10%). However, it is still difficult to predict the magnitude of this error as it highly depends on some biological parameter values such as the maximum storage quota  $Q_{max}$  or the growth rate. The main outcomes from this study are:

1. Taking into account the life history in models can impact the results only in cases where the water column is partially mixed and in the presence of environmental gradients.
2. The largest discrepancies between the two formulations occur for intermediate diffusivity values ( $10^{-4}$  -  $10^{-3}$   $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ).
3. Eulerian and Lagrangian formulations can produce significantly different results for realistic mixing scenarios.

These results constitute a starting point to answer the question addressed here. Should we model phytoplankton dynamics using the classical Eulerian paradigm or a Lagrangian formulation, which is the only way to take into account the life history of individual cells or group of cells, i.e. the variability among the members of a population? Results from our study would support the use of a Lagrangian approach instead of his Eulerian counterpart to apply new types of equations describing physiological response for phytoplankton to their environment. Nonetheless, numerous other complex mechanisms are responsible of introducing variability between individuals which are not specifically induced by different life histories (e.g mutations during cell division) ([Hellweger and Bucci, 2009](#)) therefore not only related to mixing conditions. This discussion will then focus on 2 axes: (1) how could other sources of variability influence the whole population and what is the role of mixing in this context; (2) the classical argument used to explain the differences in the results between the Eulerian and Lagrangian approaches is the combination of non-linearity and the presence of external gradients. The second point thus discusses the role of non-linearity.

### 2.5.1 Other sources of heterogeneity

As mentioned by [Hellweger and Bucci \(2009\)](#) and in previous sections, there are many causes for intrapopulation heterogeneity and each source of variability will not affect the whole population in the same way. One example is photoacclimation. As cells are transported through the water column, they experience many different light conditions and are able to acclimate in adjusting their physiological response to ambient light (i.e. changing their Chl:C ratio) ([Perry et al., 1981](#); [Falkowski and LaRoche, 1991](#); [Geider et al., 1997](#); [MacIntyre et al., 2002](#)). If mixing is weak, the time scale of vertical transport is less than the photoresponse time scale and cells can thus acclimate. As a result, population at a given depth is composed of many individuals with different photoacclimation characteristics depending on cells life histories. However, if mixing is strong, phytoplankton cells have not enough time to adjust their response to a changing environment and thus intrapopulation heterogeneity will be minimized. There is also in this case a clear connection between mixing and heterogeneity. However, contrasting with our study, light gradients are not "mixable" as nutrient gradients are; light only affects growth time scales. Several studies attempted a comparison between Lagrangian and Eulerian formulation of a photoresponse model. ([Lande and Lewis, 1989](#)) found no differences between the two approaches (< 1% NRMSE of the total biomass). On the other hand, ([McGillicuddy, 1995](#)) also performed a similar comparison with two different photoadaptation models and found much more discrepancies between Eulerian and Lagrangian approaches (~ 20% NRMSE of the total biomass). He concluded that the main difference between the two studies relied on the photoadaptation model used. Another explanation can be found in the value of the diffusivity used in [Lande and Lewis \(1989\)](#). They used a constant diffusivity value of  $10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ . We showed in the previous section that for these values, heterogeneity is low and there is little difference between Eulerian and Lagrangian formulations. What happen then if we take into account several sources of heterogeneity? As mentioned in section 1, a big trend in modelling is to add more physiological equations in the models. New generations of models thus contain mechanisms like Droop

kinetics, photoacclimation (Ross and Geider, 2009), multnutrient limitations and many others. Our results demonstrate that using these types of equations in the classical Eulerian paradigm can lead to significant errors so that adding more processes will probably increase these errors. Hence, the use of individual-based modelling seems to be more judicious. It is thus fundamental for modellers to inquire about the motivations, the processes which will be represented and the physical environment before choosing which formulation, Eulerian or Lagrangian to use.

In our study, we investigated the importance of mixing and life history with a 1D model focusing only on vertical displacements and gradients. This choice remains valid because in oceanic systems, gradients are usually stronger along the vertical dimension. We could then expect to get a large intrapopulation heterogeneity on the vertical. However, on horizontal scales, turbulent stirring causes phytoplankton to be displaced rapidly on large distances by eddies at scales ranging from 1 to 100 km (Abraham, 1998). Phytoplankton could thus experience a wide range of environments, that will thus increase intrapopulation heterogeneity. Some environments like fronts where horizontal gradients are strong could be areas with large intra-population heterogeneity and thus, Lagrangian modelling would be, again, significantly more accurate than its Eulerian counterpart.

### **2.5.2 Non-linearity**

It has been argued by Woods and Onken (1982), Hellweger and Kianirad (2007) and in previous sections that the difference between Eulerian and Lagrangian formulations relied on non-linearity and Jensen's inequality. In their study, Hellweger and Kianirad (2007) argued that non-linearity in the model occurs with the choice of biological model used. To test this hypothesis they linearised the Monod equation and showed that in this case, Eulerian and Lagrangian formulations provided the same results. We show here that this procedure is not adequate to test the Jensen's inequality. Figure 24 shows the results of Eulerian and Lagrangian models using the complete non-linear Monod equation. It appears that the two results are

effectively the same. Here, it is not the non-linearity that explains a difference but rather the hypothesis behind the Droop and Monod models. In Monod's model, growth only depends on light and external nutrients amounts. Thus all individuals of a population at a given time and location will have the same physiological response. Life history of individuals doesn't make any difference. However, in the Droop formulation, growth and nutrient uptake are decoupled and depend on internal nutrient content. The physiological state of each individual at a given time and location depends of the physiological state of individuals at previous times. Even though Droop and Monod have the same "amount of non-linearity", behaviour are sensibly different. To correctly test Jensen's inequality, let us linearize the Droop's model in the following way  $\mu_P = P_I(\mu_{P,MAX}Q/Q_{max})$

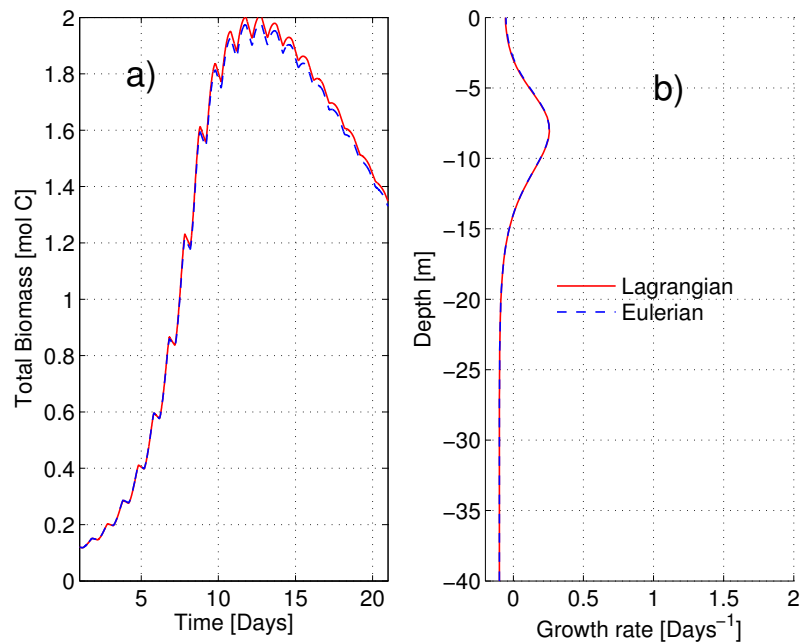


Figure 24: Eulerian and Lagrangian simulations of phytoplankton growth using Monod's equations. a) Total biomass. b) Growth rate profile after 15 days

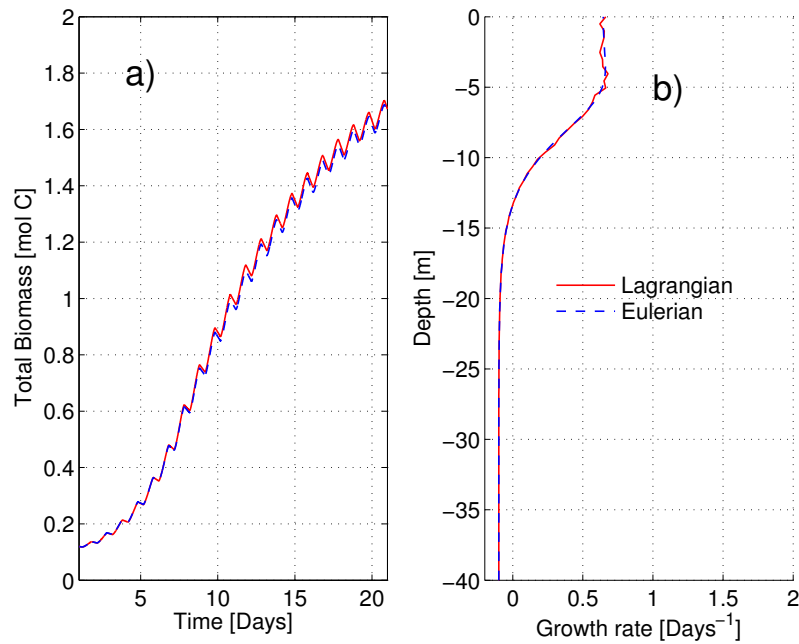


Figure 25: Eulerian and Lagrangian simulations of phytoplankton growth using linearised Droop equations. a) Total biomass. b) Growth rate profile after 15 days

Figure 25 illustrates that the two approaches give the same results when equations are linear. This result supports the argument that it is the Jensen inequality which causes the difference between Eulerian and Lagrangian formulations.

## 2.6 Supporting information

The FORTRAN version of the model is available at:

[https://gitlasso.uqar.ca/bauj0001/gitlagrangian\\_model.git](https://gitlasso.uqar.ca/bauj0001/gitlagrangian_model.git)

## 2.7 Acknowledgments

We thank Oliver Ross for providing several parts of the code and Ferdi Hellweger for his help. This research was funded by a NSERC Discovery Grant No.402257-2013 to D. Dumont.





## CONCLUSION GÉNÉRALE

Cette étude adresse la question de la représentation du phytoplancton dans les modèles. Elle a été très largement inspirée par les travaux de [Hellweger and Kianirad \(2007\)](#) dans lesquels est présenté l'une des premières comparaisons explicites des formulations Eulérienne et Lagrangienne, mettant ainsi en évidence l'importance de la prise en compte de la variabilité entre les individus d'une population. Dans le but d'aller un peu plus loin dans cette démarche, la question adressée dans le présent mémoire porte sur la manière dont le régime de turbulence module cette importance. En effet, la variabilité du comportement entre les individus d'une population provient en majeure partie de l'historique de vie des cellules dans la colonne d'eau et dépend donc intrinsèquement de la turbulence. Pour répondre à cet objectif, une comparaison d'un modèle simple de croissance du phytoplancton intégré de manière Eulérienne et Lagrangienne a été réalisée sous différentes conditions de mélange.

Les résultats ont révélé que :

1) En absence de gradients environnementaux, les différences entre les individus sont nulles. En effet, la quantité de nutriments à laquelle les cellules sont exposées est la même pour toutes quelle que soit leur trajectoire dans la colonne d'eau et l'approche Eulérienne permet dans ce cas de représenter de manière adéquate la dynamique du phytoplancton.

2) En présence de gradients, la variabilité entre les individus se trouvant à un moment et un endroit donné dans la colonne d'eau augmente à mesure que la turbulence augmente. Dans le cadre de notre étude, la variabilité maximale se retrouve pour des valeurs de turbulence de  $10^{-4} - 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Pour des valeurs plus fortes de turbulence, la colonne d'eau devient rapidement mélangée et l'on se retrouve ainsi dans le cas présenté en 1). Cette variabilité, associée à la non-linéarité des processus biologiques considérés, entraîne une différence significative entre résultats issus des simulations Eulériennes et Lagrangiennes. Ceci démontre donc de l'importance de cette variabilité entre individus sur la dynamique de l'ensemble de la popu-

lation. Cette importance se démontre aussi pour des scénarios de mélange réaliste tel qu'un scénario de mélange tidal.

Clairement, le fait de ne pas prendre en compte la variabilité entre individus dans les modèles Eulériens entraîne une erreur non négligeable dans certains cas. Dans d'autres cas il se peut que l'erreur introduite soit petite comparativement aux erreurs commises par exemple sur la valeur des paramètres utilisés. Cette erreur pourrait donc être perdue lors de la calibration du modèle (Hellweger 2009). Bien que la comparaison réalisée dans cette étude nous permet de déterminer qualitativement l'erreur commise pour un régime de turbulence donné, il reste malheureusement difficile de prédire avec certitude sa valeur qui nécessiterait une connaissance exacte de la distribution de cette variabilité. Nous avons fait l'hypothèse dans cette étude que l'approche Lagrangienne nous permettait d'avoir une bonne approximation de la variabilité qu'il existe en milieu naturel grâce à la simulation explicite de chaque individu. En effet, l'hypothèse fondamentale sur laquelle repose cette étude est que la variabilité de certains traits physiologiques (dans notre cas le ratio N:C) pour une profondeur donnée à un instant donné suit une certaine distribution liée à l'historique de vie des cellules dans la colonne d'eau. Toutefois peu de mesures in-situ de la variabilité entre individus sont disponibles présentement ce qui pose un frein à la validation de l'approche Lagrangienne. S'il s'avère que l'approche Lagrangienne permet de représenter quantitativement cette variabilité, alors il est fort probable qu'elle trouve à terme une certaine utilité.

Peut-on toutefois réconcilier les deux approches? En d'autres termes, peut-on prendre en compte la variabilité entre les individus dans un modèle de type eulérien, donc sans représenter explicitement chaque individu et leurs historique de vie? Les résultats ont montré que du fait de l'inégalité de Jensen, les simulations eulériennes tendent à surestimer les résultats. La façon la plus triviale de corriger cela serait de faire décroître les résultats en appliquant un facteur de correction issue de notre connaissance de la magnitude de l'erreur commise. Une autre manière serait de considérer que les valeurs de certaines variables (dans notre cas, la quantité de nutriments présents dans la cellule) sont issues de processus aléatoires

représentatif de la variabilité engendrée par l'historique de vie des individus. Par exemple, la quantité de nutriments intracellulaire à un temps et un endroit donné correspondrait à une moyenne sur un certain nombre de tirages issues de la distribution de cette variable centrée sur la valeur moyenne eulérienne. Dans les deux cas il est nécessaire de posséder une bonne connaissance de cette distribution. Sachant que celle-ci est directement fonction de l'historique de vie des cellules dans la colonne d'eau, elle même fonction des conditions environnementales (présence de gradients, régime de turbulence), sa forme est donc peu prédictible. L'approche Lagrangienne s'avère donc clairement la plus adéquate pour prendre en compte la variabilité entre les individus.

Que ce soit par le biais d'approche Lagrangienne ou Eulérienne, il est clair que tant que les modèles ne trouveront pas un moyen de prendre en compte cette variabilité entre individus, ils échoueront à représenter de manière quantitative la dynamique du phytoplancton en milieu naturel.



## RÉFÉRENCES

- Abraham, E. (1998). The generation of plankton patchiness by turbulent stirring. *Nature*, 391:577–580.
- Arhonditsis, G. B. and Brett, M. T. (2004). Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Marine Ecology Progress Series*, 271:13–26.
- Baklouti, M., Diaz, F., Pinazo, C., Faure, V., and Quéguiner, B. (2006). Investigation of mechanistic formulations depicting phytoplankton dynamics for models of marine pelagic ecosystems and descriptions of a new model. *Progress in Oceanography*, 71:1–33.
- Boyd, P. and Doney, S. (2002). Modelling regional responses by marine pelagic ecosystems to global climate change. *Geophysical Research Letters*, 29(16):53–1.
- Brand, L. and Guillard, R. (1999). The effects of continuous light and light intensity on the reproduction rates of twenty-two species of marine phytoplankton. *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*, 50(2):119–132.
- Broekhuizen, N. (1999). Simulating motile algae using a mixed Eulerian-Lagrangian approach: does motility promote dinoflagellate persistence or co-existence with diatoms? *Journal of Plankton Research*, 21(7):1191–1216.
- Broekhuizen, N., Oldham, J., and Zeldis, J. (2003). Sub-grid-scale differences between individuals influence simulated phytoplankton production and biomass in a shelf-sea system. *Mar. Ecol. Prog. Ser.*, 252:61–76.
- Cianelli, D., Uttieri, M., and Zambianchi, E. (2011). Individual based modelling of planktonic organisms. In Zhang, W.-J., editor, *Ecological Modelling*, pages 83–96. Nova Science Publishers.
- Cullen, J. and Lewis, M. (1988). The kinetics of algal photoadaptation in the context of vertical mixing. *Journal of Plankton Research*, 10(5):1039–1063.
- Denman, K. and Gargett, A. (1983). Time and space scales of vertical mixing and advection of phytoplankton in the upper ocean. *Limnology and Oceanography*, 28:801–815.
- Denman, K. and Platt, T. (1976). The variance spectrum of phytoplankton in a turbulent ocean. *Journal of Marine Research*, 34:593–601.
- Dortch, Q. and Maske, M. (1982). Dark uptake of nitrate and nitrate reductase activity of a red-tide population off peru. *Marine ecology progress series*, 9(3):299–303.
- Droop, M. (1974). The nutrient status of algal cells in continuous culture. *J. Mar. Biol. Assoc. U. K.*, 54:825–855.

- Durham, W., Kessler, J., and Stocker, R. (2009). Disruption of vertical motility by shear triggers formation of thin phytoplankton layers. *science*, 323(5917):1067–1070.
- Falkowski, P. and LaRoche, J. (1991). Minireview: Acclimation to spectral irradiance in algae. *J Phycol*, 27:8–14.
- Franks, P. J. (2002). NPZ Models of Plankton Dynamics: Their Construction, Coupling to Physics, and Application. *Journal of Oceanography*, 58:379–387.
- Fredrick, N. D., Berges, J. A., Twining, B. S., D, N.-M., and Hellweger, F. L. (2013). Use of Agent-Based Modeling To Explore the Mechanisms of Intracellular Phosphorus Heterogeneity in Cultured Phytoplankton. *Marine Ecology Progress Series*, 79(14):4359–4368.
- Geider, R., MacIntyre, H., and Kana, T. (1997). A dynamic model of phytoplankton growth and acclimation: responses of the balanced growth rate and chlorophyll a : carbon ratio to light, nutrient-limitation and temperature. *Mar. Ecol. Prog. Ser.*, 148:187–200.
- Hamilton, D. and Schladow, S. (1997). Prediction of water quality in lakes and reservoirs. 1. Model description. *Ecol. Model.*, 96:91–110.
- Hellweger, F. and Bucci, V. (2009). A bunch of tiny individuals—individual-based modeling for microbes. *Ecol. Model.*, 220:8–22.
- Hellweger, F. and Kianirad, E. (2007). Accounting for Intrapopulation Variability in Biogeochemical Models Using Agent-Based Methods. *Environ. Sci. Technol.*, 41:2855–2860.
- Huisman, J., Sharples, J., Stroom, J., Visser, P., Kardinaal, W., and Verspagen, J. (2004). Changes in turbulent mixing shift competition for light between phytoplankton species. *Ecology*, 85:2960–2970.
- Hunter, J., Craig, P., and Phillips, H. (1993). On the use of random walk models with spatially variable diffusivity. *J. Comput. Phys.*, 106:366–376.
- Jassby, A. and Platt, T. (1976). Mathematical formulation of the relationship between photosynthesis and light for phytoplankton. *Limnology and Oceanography*, 21:540–547.
- Kamykowski, D., Yamazaki, H., and Janowitz, G. S. (1994). A Lagrangian model of phytoplankton photosynthetic response in the upper mixed layer. *J. Plankton Res.*, 16:1059–1069.
- Lande, R. and Lewis, M. (1989). Models of photoadaptation and photosynthesis by algal cells in a turbulent mixed layer. *Deep-Sea Res.*, 8:1161–1175.
- Large, W. G. and McWilliams, J. C. (1994). Oceanic vertical mixing: a review and a model with a nonlocal boundary layer parameterization. *Rev. Geophys.*, 32:363–403.

- Lewis, M., Horne, E., Cullen, J., Oakey, N., and Platt, T. (1984). Turbulent motions may control phytoplankton photosynthesis in the upper ocean. *Nature*, 311:49–50.
- MacIntyre, H., Kana, T., Anning, J., and Geider, R. (2002). Photoacclimation of photosynthesis irradiance response curves and photosynthetic pigments in microalgae and cyanobacteria. *J. Phycol.*, 38:17–38.
- Margalef, R. (1978). Life-forms of phytoplankton as survival alternatives in an unstable environment. *Oceanol. Acta*, 1:493–509.
- Marra, J. (1978). Phytoplankton photosynthetic response to vertical movement in a mixed layer. *Mar. Biol.*, 46:203–208.
- Martin, J., Tremblay, J., and Price, N. (2012). Nutritive and photosynthetic ecology of subsurface chlorophyll maxima in Canadian Arctic waters. *Biogeosciences*, 9(12):5353–5371.
- McGillicuddy, D. (1995). One dimensional numerical simulation of primary production: Lagrangian and Eulerian formulation. *J. Plankt. Res.*, 17:405–412.
- Nagai, T., Yamazaki, H., and Kamykowski, D. (2003). A Lagrangian photoresponse model coupled with 2nd-order turbulence closure. *Marine Ecology Progress Series*, 265:17–30.
- Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer-Verlag, Berlin.
- Perry, M., Talbot, M., and Alberte, R. (1981). Photoadaptation in marine phytoplankton: response of the photosynthetic unit. *Marine Biology*, 62:91–101.
- Platt, T., Gallegos, C., and Harrison, W. (1980). Photoinhibition of photosynthesis in natural assemblages of marine phytoplankton. *J. Mar. Res.*, 38:687–701.
- Ross, O. and Sharples, J. (2004). Recipe for 1-d Lagrangian particle tracking models in space-varying diffusivity. *Limnol. Oceanogr. Methods*, 2:289–302.
- Ross, O. and Sharples, J. (2007). Phytoplankton motility and the competition for nutrients in the thermocline. *Mar. Ecol. Prog. Ser.*, 347:21–38.
- Ross, O. N. (2006). Particles in motion: How turbulence affects plankton sedimentation from an oceanic mixed layer. *Geophysical research letters*, 33(10).
- Ross, O. N. and Geider, R. J. (2009). New cell-based model of photosynthesis and photoacclimation: accumulation and mobilisation of energy reserves in phytoplankton. *Mar. Ecol. Prog. Ser.*, 383:53–71.
- Ross, O. N., Geider, R. J., Berdalet, E., Artigas, M. L., and Piera, J. (2011). Modelling the effect of vertical mixing on bottle incubations for determining in situ phytoplankton dynamics. I. Growth rates. *Marine Ecology Progress Series*, 435:13–31.

- Ross, O. N. and Sharples, J. (2008). Swimming for survival: a role of phytoplankton motility in a stratified turbulent environment. *Journal of Marine Systems*, 70(3):248–262.
- Saadi, N. E. and Bah, A. (2007). An individual-based model for studying the aggregation behaviour in phytoplankton. *Ecological modelling*, 204(1):193–212.
- Schuler, A. (2005). Diversity matters: dynamic simulation of distributed bacterial states in suspended growth biological wastewater treatment systems. *Biotechnol. Bioeng.*, 91:62–74.
- Sharples, J. (1999). Investigating the seasonal vertical structure of phytoplankton in shelf seas. *Marine Models*, 1(1):3–38.
- Steele, J. and Henderson, E. (1992). The role of predation in plankton models. *Journal of Plankton Research*, 14:157–172.
- Tilman, D., Kilham, S., and Kilham, P. (1982). Phytoplankton community ecology: The role of limiting nutrients. *Ann. Rev. Ecol. Syst.*, 13:349–372.
- Umlauf, L. and Burchard, H. (2005). Second-order turbulence closure models for geophysical boundary layers. A review of recent work. *Cont. Shelf Res.*, 25(7):795–827.
- Visser, A. (1997). Using random walk models to simulate the vertical distribution of particles in a turbulent water column. *Mar Ecol Prog Ser*, 158:275–281.
- Visser, A. (2008). Lagrangian modelling of plankton motion: From deceptively simple random walks to Fokker-Planck and back again. *Journal of Marine Systems*, 70:287–299.
- Woods, J. and Onken, R. (1982). Diurnal variation and primary production in the ocean preliminary results of a Lagrangian ensemble model. *J. Plankt. Res.*, 4:735–756.
- Yamazaki, H. and Kamykowski, D. (1991). The vertical trajectories of motile phytoplankton in a wind-mixed water column. *Deep-Sea Res.*, 38:219–241.
- Yamazaki, H., Mitchell, J., Seuront, L., Wolk, F., and Hua, L. (2006). Phytoplankton microstructure in fully developed oceanic turbulence. *Geophys. Res. Lett.*, 33:L01603.