



HAL
open science

Modélisation de la dégradation bactérienne de solutés organiques dans les sols : impact couplé des traits biologiques bactériens, des répartitions spatiales et des processus de transport

Alexandre Coche

► **To cite this version:**

Alexandre Coche. Modélisation de la dégradation bactérienne de solutés organiques dans les sols : impact couplé des traits biologiques bactériens, des répartitions spatiales et des processus de transport. Sciences de la Terre. Université de Rennes, 2021. Français. NNT : 2021REN1B019 . tel-03617715

HAL Id: tel-03617715

<https://theses.hal.science/tel-03617715>

Submitted on 23 Mar 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE DE DOCTORAT DE

L'UNIVERSITE DE RENNES 1

ECOLE DOCTORALE N° 600

Ecole doctorale Ecologie, Géosciences, Agronomie et Alimentation

Spécialité : « *Sciences de la Terre et de l'Environnement* »

Par

Alexandre COCHE

Modélisation de la dégradation bactérienne de solutés organiques dans les sols

Impact couplé des traits biologiques bactériens, des répartitions spatiales et des processus de transport

Thèse présentée et soutenue à Rennes, le 9 juillet 2021

Unité de recherche : Géosciences Rennes – UMR 6118

Rapporteurs avant soutenance :

Arnaud DECHESNE
Sébastien FONTAINE

Senior researcher, DTU (Dpt. d'Ingénierie Environnementale)
Directeur de recherche, INRAE (UREP)

Composition du Jury :

Président : Luc AQUILINA
Examineurs : Arnaud DECHESNE
Sébastien FONTAINE
Patricia GARNIER
Séverine PIUTTI
Alain RAPAPORT
Xavier RAYNAUD
Dir. de thèse : Jean-Raynald DE DREUZY

Professeur, Université de Rennes 1 (Géosciences Rennes)
Senior researcher, DTU (Dpt. d'Ingénierie Environnementale)
Directeur de recherche, INRAE (UREP)
Directrice de recherche, INRAE (ECOSYS)
Maître de conférences, ENSAIA (LAE)
Directeur de recherche, INRAE (MISTEA)
Maître de conférences, Sorbonne Université (IEES-Paris)
Directeur de recherche, Université de Rennes 1 (Géosciences Rennes)

À la mémoire de mes papys

Archange et Paul

À la mémoire de

Thibault Schmitt

*Il est inutile de précipiter une journée
qui s'écoule avec la sage lenteur de
l'éternité.*

— auteur inconnu

*Si moi j'y suis arrivé, c'est que vous
aussi vous pouvez le faire.*

— Luc Burté, alors tout juste
docteur

Remerciements

Au-delà de toutes les contributions scientifiques qui ont nourri cette thèse (et dont un aperçu pourra être trouvé dans le [préambule](#) et la [bibliographie](#)), la réalisation de ce travail a été rendue possible par un nombre inestimable de contributions sur le plan humain, de soutiens, d'implications, d'aides petites et grandes, multiples et variées. Généralement une thèse, on est content quand ça commence, on est content quand ça se termine. Entre les deux, il y a tout un tas de personnes qui rendent le périple surmontable. J'aimerais remercier ici toutes celles et ceux qui ont participé, parfois sans le savoir, à cette aventure.

Parmi eux, j'aimerais remercier tout d'abord mes deux encadrants **Jean-Raynald** et **Alain**, pour m'avoir non seulement offert l'opportunité de faire cette thèse, mais aussi pour avoir su voir que ce sujet allait me passionner avant que je ne le sache moi-même (!). Avec le recul, au regard de mon parcours à l'époque principalement orienté vers les biotechnologies et le travail de paillasse, il leur a fallu une confiance et une clairvoyance impressionnantes pour faire ce pari et je leur en suis très reconnaissant. La confrontation à ce sujet nouveau m'a énormément appris dans ma manière d'appréhender le choix de faire de la recherche sur une thématique donnée. J'aimerais les remercier pour cette expérience précieuse ainsi que pour leurs encouragements constants et la gentillesse, la bienveillance et la patience dont ils ont fait preuve tout au long de ma thèse. Je tiens à remercier également **Tristan** pour sa bonne humeur, ses encouragements et son investissement colossal pour me passer le relai. Toute cette thèse tient beaucoup à son aide (à ce niveau je dirais même son mentorat !) et à la disponibilité qu'il m'a accordé tout du long, même avec 10h de décalage horaire.

J'aimerais remercier **Arnaud Dechesne** et **Sébastien Fontaine** qui ont accepté d'être rapporteurs de cette thèse, ainsi que **Luc Aquilina**, **Patricia Ganier**, **Xavier Raynaud** et **Séverine Piutti** qui ont accepté de constituer le jury. Leurs regards sur ma thèse et les échanges très valorisants que nous avons eus ont été pour moi un encouragement essentiel à la poursuite de mon parcours de recherche.

Je tiens également à remercier **Meri**, **Allison** et **Etienne** pour leur relecture minutieuse (et rudement efficace) des 300 pages de ce manuscrit, ainsi que **Diane**, **Quentin**, **Elias** et **Lucas** pour m'avoir patiemment écouté.

Cette thèse a été financée par le projet ANR *Soilμ3D* coordonné par **Patricia** que j'aimerais remercier pour cette opportunité. Plus généralement, j'aimerais remercier chaleureusement l'ensemble des membres du projet, en particulier **Laure, Patricia, Naoise, Xavier P., Xavier R., Valérie, Claire, Jérôme, Philippe** et **Wilfred** pour les moments toujours agréables passés ensemble et pour le temps, l'intérêt et la motivation qu'ils m'ont accordés. J'ai eu également la chance de bénéficier de la disponibilité de **Théodore, Tanguy** et **Jérôme** et de la bienveillance dont ils ont fait preuve en acceptant de suivre le déroulement de ma thèse. Le suivi humain de cette thèse a été tout aussi important que le suivi scientifique. I want to thank also **Holger Pagel** and **Luciana Chavez** for their interest, which was a very valuable motivation.

Le chemin qui m'a conduit jusqu'à ce sujet de thèse et les compétences qui m'ont servi tiennent beaucoup à de nombreux enseignants que j'ai pu avoir sur mon parcours et à leurs cours passionnants, ainsi qu'à mes maîtres de stage et leur accompagnement toujours très précieux.

Cette aventure doit par ailleurs énormément aux amitiés et à la bonne ambiance dont j'ai pu bénéficier chaque jour passé à Rennes. J'aimerais vraiment remercier toute l'équipe de Géosciences Rennes et de l'OSUR qui m'a permis de passer ces 4 années, 6 mois et 2 confinements dans un cadre aussi agréable. J'ai toujours eu de très bons souvenirs de mes expériences en laboratoires de recherche, mais je pense que l'atmosphère au sein de GR est assez exceptionnelle. J'espère qu'il en sera toujours ainsi.

J'aimerais remercier mes compagnons de bureau du mythique Pé209 (Pé pour Party) avec qui j'ai partagé mes premières années de thèse, les minots **Quentin, Etienne** et **Diane**, pour leur humour si raffiné (si le recueil des punchlines du bureau est édité un jour, ce sera un bestseller, enfin dans sa catégorie), les fous rires, les courses de chaises à roulettes, leur énergie, les hauts et les bas, les coups de gueule, l'auto-dérision, bref pour avoir rendu mes journées de travail autant improbables que joyeuses et pour cette ambiance (mi-sérieuse) mi-folklo, indispensable pour décompresser. Ce n'était pas toujours facile de se concentrer avec les boomerangs qui volaient au-dessus de nos têtes et les balles de nerfs qui sifflaient à côté de nos oreilles, mais c'est peut-être ça aussi la thèse, c'est du vent dans les cheveux et des étoiles dans les yeux (en fonction du projectile). Je suis fier aussi, bien sûr, d'avoir pu collaborer aux répliquats ayant contribué à la vérification expérimentale de la « théorie des 75 cl ». J'aimerais remercier **Behzad** d'avoir rejoint le Pé209 en ses heures de sous-effectif et d'avoir partagé sans modération sa bonne humeur, sa gentillesse et son regard calme sur toute situation. Wish you the very best of UK! Je voudrais également remercier **Camille**, colocataire par intermittence du Pé209, pour sa bonne humeur communicative et nos discussions parfois idéalistes, parfois pragmatiques, souvent originales mais toujours motivantes ! C'était tout simplement « Peccable ». Puis comme on dit dans la recherche contractuelle, une génération s'en va, une nouvelle la remplace, et je remercie **Elias** d'avoir repris le flambeau du Pé209 et pour nos discussions toujours très riches, au labo et en dehors (ainsi que pour avoir su sublimer la moustache). Je tiens également particulièrement à remercier **Jean**, pour avoir partagé un directeur de thèse, un appart, et beaucoup de bons moments et de conversations enrichissantes (ainsi qu'un risotto de folie !).

Pour tous les formidables moments partagés, les pauses cafés Ker Kadelac, les volleys, les cinés (Jacquet surtout !), les billards, les frisbees, les apéros, les soirées en tout genre, les *board games*

(jamais *bored*), les escapades littorales, les manifs, le(s) footing(s), les trails (en vélo¹), les soutenances de thèse, les photos impubliables (sauf dans quelques documents confidentiels appelés « livrets de thèse »), et j'en passe... j'aimerais remercier tous les amis géologues, biologistes et compères rennais, **Luca**, avec qui nous avons porté haut les couleurs de Pint of Sciences, **Lucille, Louise**, voisine de bureau et de Patton, **Etienne** et **Allison** qui ont fait de Champ Jacquet un haut lieu de festoiments, **Diane**, pour nos dessins si artistiques sur le tableau (prévu à cet effet ?), **Quentin**, d'avoir sensiblement enrichi mon vocabulaire musical (entre autres vocabulaires), **Charlotte**, de m'avoir fait découvrir les plus beaux coins de la Côte d'Émeraude, **Justine**, pour la recette des pêches au thon (le RU n'a qu'à bien se tenir), **Madeleine, Behzad, Nataline, Maxime**, de m'avoir enseigné le lancer de frisbee « *hammer reverse shadow* », **Thomas**, de m'avoir aidé à parfaire mon « *shadow hammer reverse* », **Baptiste**, dont le nombre de km courus à son actif dépasse le nombre de mots de ce manuscrit², **Arthur, Claire, Julien, Antoine, Alice, Aurélie W., Phoom**, les « petits nouveaux »³ **Ronan, Elias, Nicolas, Lucas, Hugo** et les « grands anciens » **Luc, Eliot, Diana, Dani, Olivier, Régis, Aurélie G., Amory, Jérôme, Marie-Françoise**, et toutes les personnes avec qui j'ai pu partager le quotidien OSURien. Je garde de mon passage à (Géosciences) Rennes des souvenirs plus que chaleureux et mémorables grâce à eux.

Pour les plantes du bureau, celles qui ont survécu et celles qui ont ressuscité, j'aimerais remercier **Cécile, Elias** et **Secondine**.

J'aimerais remercier **Catherine, Chantal, Anne, Aline** et **Thierry** pour leurs multiples aides administratives, indispensables, ainsi qu'**Annick** pour son assistance en informatique et sans qui mes résultats de thèse n'auraient pas vu le jour, faute d'accès aux serveurs et de windows. Je veux remercier également **Anne-Joëlle Chauvin** et **Hélène Tanguy** pour leur extrême patience et compréhension (encore aujourd'hui...) dans le suivi de mon dossier de doctorat et mes multiples péripéties.

J'aimerais aussi remercier **Thierry, Nicolas, Christophe, Luc A., Olivier** et **Yves** pour m'avoir fourni le matériel et l'opportunité d'enseigner, une chance très enrichissante.

Je tiens à décerner un meuglement tout particulier de remerciements aux Zoulous **Max – Mé/Profesor–, Mathilde, Séb – Mr. Kakaraoké–, Vivi**, venue depuis la « vraie » Bretagne finistérienne pour voir la soutenance de cette thèse, **Gaëtan, Clara – doune–, et Benji**, de m'avoir soutenu, ressourcé, supporté, *converti au D3*, accueilli chez vous toujours royalement, et pour tous les moments inoubliables passés ensemble pendant cette thèse (et depuis 12 ans), la découverte de Rennes, ses vélostars, son bitume, les festivaux musicaux, les midi Gavotte, les soirées cocktails, les anniv, les feux d'artifice d'intérieur, la liste est longue . . . Vous avoir comme amis est une chance énorme. Merci d'être venus me voir à Rennes un nombre incalculable de fois. Maintenant c'est à mon tour de venir !

¹ électrique

² Je laisse le soin à toi lecteur, lectrice, de compter.

³ Ca mériterait quelques paires de guillemets en plus

J'aimerais remercier également **Cécile** de m'avoir largement aidé, conseillé, motivé sur l'avant-thèse, le pendant-thèse et l'après-thèse, et pour les découvertes gastronomiques salutaires pour tenir la durée d'une thèse (certains carburent au café, d'autres aux cuberdons).

J'aimerais remercier aussi **Thibault L.** pour ses réflexions philosophiques qui ont sans aucun doute influencé les réflexions de ce manuscrit, et pour nos conversations toujours enrichissantes.

Je remercie avec beaucoup d'admiration mes collocs' de Patton (à prononcer [p^heɪtʌn]) **Iwan, Marion, Pauline, Jean, Laura, Nicolas, Manon, Adrien, Stéphanie** et **Marine**, de m'avoir supporté, surtout en fin de thèse.

J'aimerais finir en remerciant ma famille. Ces quelques lignes ne suffiront jamais à exprimer tout ce que je dois, et par extension tout ce que cette thèse doit, à **mes parents, ma sœur et mon frère**. Il n'y a pas un jour où ils n'ont pas été là pour moi, pendant la thèse, avant et après. Pour m'avoir constamment soutenu sans la moindre hésitation, pour m'avoir supporté jusqu'au bout de la thèse, pour m'avoir écouté, conseillé, instruit, pour m'avoir enrichi, au sens noble, pour avoir pris soin de moi plus que de raison, pour avoir toujours tout fait pour me donner toutes les conditions, tout le cadre idéal pour envisager cette thèse sereinement, cette thèse est aussi la leur. Dire que leurs noms mériteraient d'apparaître en couverture est évident. C'est aussi à **mon frère** que je dois à la fois l'envie de programmer et l'essentiel des connaissances informatiques qui m'ont servi dans cette thèse. À mon *brother-in-law* **Matt** et mes nièces **Chloe** et **Holly**, pour m'avoir toujours redonné le sourire. À mes mamies **Alice** et **Annette** qui ont toujours été très fières de mes péripéties doctorales, ainsi que tous mes oncles et tantes, cousins et cousines, **Isabelle, Philippe, Nadine, Sylvianne, Michel, Bernadette, Rémi, Candice, Emilie, Baptiste, Manon, Bérenger, Pascale, Valérie, Maël** et **Mailys**, de s'être toujours montrés très encourageants et optimistes et d'avoir eu la patience de ne pas se lasser de me demander comment ma thèse avançait (et ce n'est pas peu dire). À ma famille kazakho-britannique (ou britanno-kazakhe) **Marzhan Apa, Makhsuda, Mark, Mariyam** et **Michelle**, pour m'avoir accueilli aussi chaleureusement et pour toute l'affection qu'ils m'ont donnée.

Enfin, c'est aussi ici à Géosciences Rennes que j'ai fait la rencontre de celle qui m'est la plus chère. Merci **Meri** pour ton soutien infini, même quand il y avait 3 fuseaux horaires entre nous, merci pour ton aide inconditionnelle, merci de m'avoir supporté, d'avoir été tolérante, patiente, compréhensive à l'extrême. Les mots ne suffisent pas pour exprimer la chance que j'ai de t'avoir à mes côtés. C'est en grande partie ton énergie qui a alimenté cette thèse. Merci de rendre possible l'impossible. Merci pour tout, tout simplement. Моя Жемчужина, мой Космос, моя Бесконечность. Je sais que certains jours j'ai donné l'impression d'être marié à mes modèles... mais eux, je suis capable de m'en passer ;)

La liste est bien évidemment trop longue et il y aura sûrement eu des remerciements oubliés ou maladroits... Que les personnes que j'ai omises me pardonnent.

PS : Cette section remerciements ne sait pas vraiment complète sans rappeler que cette thèse, comme je crois la plupart des accomplissements dans une société, n'aurait pu voir le jour sans le travail souvent anonyme de celles et ceux grâce à qui j'ai pu avoir de quoi vivre en bonne santé au quotidien, de quoi avoir un outil de travail et toute l'infrastructure pour développer et faire tourner mes modèles, de quoi avoir l'éducation et l'accès aux connaissances nécessaires pour faire ce travail, et bien d'autres contributions tout aussi essentielles. A Sci-hub et Alexandra Elbakyan, sans qui la bibliographie et la pertinence de cette thèse aurait été réduites de trois quarts. Aux passionés qui oeuvrent pour les autres.

Finalement, « pourquoi » ce travail de recherche ? Et plus important encore, « pour qui » ? Est-ce que ces quelques connaissances supplémentaires sur les sols apporteront quelque chose à ceux qui s'y consacrent, aux permaculteurs dont dépend la durabilité de nos sociétés ? La difficulté réside dans le fait que, comme le dit la maxime « tout ce qui est fait pour nous mais sans nous est fait contre nous », il est souvent hasardeux de vouloir être utile à d'autres sans les impliquer, ce qui est parfois le cas avec la recherche, et sans aucun doute le cas ici. J'espère malgré tout que mes travaux de thèse auront fait bon usage de toutes les ressources, temps et financements, qui m'ont été apportées, et que le dialogue entre société et recherche se consolidera à l'avenir. J'espère enfin que, si les connaissances résultant de cette thèse sont un jour appliquées, qu'elles le soient pour une cause juste.

*Cette leçon vaut bien un fromage,
sans doute.*

— Jean de la Fontaine

Préambule – Contexte et réalisation de la thèse

Présentation de la thèse

Cette thèse de doctorat a été réalisée pendant 4 ans ½ de 2017 à 2021. Elle propose d'explorer les interactions qui peuvent exister entre les processus spatiaux et les processus biologiques impliqués dans la dégradation bactérienne du carbone organique des sols. Ce manuscrit sera organisé en cinq parties, commençant par une présentation du contexte et des problématiques scientifiques autour de ce thème (chapitre I), suivie des analyses préliminaires qui serviront de point de départ à ce travail et au développement de modèles autour desquels s'articuleront l'étude des questions identifiées (chapitre II), suivie d'une contribution majeure sous forme d'article complémenté par plusieurs annexes (chapitre III), dont les résultats et les conclusions seront élargies à des cas plus généraux (chapitre IV), avant de terminer par la suggestion de nouvelles problématiques prospectives (chapitre V).

Contributions externes et collectives

Fondations

Ce travail de thèse a hérité en premier lieu du modèle de transport bioréactif développé de 2015 à 2017 et publié par Babey et al. (2017). Le modèle que j'ai développé dans cette thèse constitue une « 2^e version » du précédent modèle, reprenant le même patron de conception pour l'organisation du programme et implémentant de nouveaux processus de transport et de dégradation, de nouvelles modalités sur les processus préexistants, ainsi qu'un cadre permettant de réaliser des expériences numériques en série (criblage de paramètres) et un ensemble d'outils de visualisation et d'analyse des résultats. L'implémentation d'une linéarisation alternative pour la résolution des équations différentielles (voir section II.5) a, quant à elle, été réalisée par Tristan Babey en février 2019.

Cette thèse a également hérité des données expérimentales exceptionnelles publiées par Pinheiro et al. (2015, 2018), qui ont fourni un cadre au modèle ainsi qu'un moyen de comparer les résultats simulés avec des données physiques. Au-delà de ces aspects, c'est au final grâce à ce jeu de données qu'a pu émerger la problématique de cette thèse (détaillée section I.3). C'est en effet la contradiction apparente entre les résultats des deux séries d'expériences (2015 et 2018) qui a montré que la localisation et le transport des bactéries et du carbone du sol ne suffisaient pas pour expliquer sa dégradation, et qu'il était nécessaire

de déterminer finement certaines caractéristiques biologiques des bactéries (voir section II.4).

Collaborations et discussions

Ce travail a été enrichi par de très nombreuses collaborations et interactions étroites, à la fois avec plusieurs membres du projet ANR *Soil μ 3D* dans lequel s'est inscrite cette thèse (voir section suivante, Contribution de cette thèse au projet ANR *Soil μ 3D*), mais aussi avec les membres du Comité de Suivi de ma thèse, avec les membres de l'unité de recherche Géosciences Rennes dont dépendait ma thèse, ainsi que par les discussions et collaborations initiées dans les congrès. Tout d'abord, cette thèse a directement fait suite à la contribution de Babey et al. (2017) et a ainsi bénéficié d'une collaboration étroite et suivie avec Tristan Babey (*Soil μ 3D*) permettant l'exploitation du modèle et des résultats obtenus précédemment. L'encadrement de cette thèse par Jean-Raynald de Dreuzy (*Soil μ 3D*) et Alain Rapaport (*Soil μ 3D*) a alimenté tout au long de ce travail le développement progressif des concepts et des modèles, dans chacun des deux axes de la problématique de cette thèse que sont les processus de transport et le métabolisme bactérien. Ces interactions ont notamment permis de transposer l'étude de la dégradation du carbone du sol à des systèmes spatialement simplifiés, et d'introduire le modèle de Contois comme alternative au modèle de Monod dans les sols. D'autre part, la collaboration étroite avec Laure Vieublé Gonod (*Soil μ 3D*) et Patricia Garnier (*Soil μ 3D*) a été indispensable pour exploiter pleinement le travail expérimental réalisé précédemment en lien avec l'ANR MEPSOM (Pinheiro et al., 2018, 2015). Les interactions nombreuses avec Naoise Nunan (*Soil μ 3D*) ont permis un apport de connaissances en écologie microbienne qui a été essentiel pour le développement des concepts proposés et pour la généralisation des résultats au carbone organique du sol. L'invitation de Holger Pagel pour présenter mes travaux à l'université de Hohenheim a donné lieu à de précieuses discussions, notamment sur le métabolisme bactérien et sur la probabilité de contact entre microorganismes et carbone. Les discussions approfondies avec Théodore Bouchez, Jérôme Harmand et Tanguy Le Borgne lors des réunions de mon Comité de Suivi et en dehors m'ont également apporté des éléments précieux sur l'interprétation des résultats et la nécessité de réaliser des expériences numériques en série, sur la conceptualisation des résultats et sur les postulats du modèle. Enfin, de nombreuses autres discussions ont contribué à la généralisation des hypothèses et des messages portés par cette thèse, notamment avec Valérie Pot (*Soil μ 3D*) sur le rôle de la géométrie, Xavier Raynaud (*Soil μ 3D*) sur le concept central d'équilibre entre diffusion et compétition et Claire Chenu (*Soil μ 3D*) sur la signification biologique potentielle de la ratio-dépendance dans les sols.

Contribution de cette thèse au projet ANR *Soil μ 3D*

Cette thèse a été financée intégralement par le projet ANR *Soil μ 3D* [ANR-15-CE01-0006, [site internet](#)]. Le rôle de cette thèse (« PhD2 ») au sein de ce projet était de développer des

modèles simplifiés à compartiments, à l'échelle de la carotte de sol. À l'origine, ces modèles devaient être capables de prédire correctement les flux de minéralisation à cette échelle à partir d'un nombre limité de descripteurs macroscopiques mesurables. Ces descripteurs macroscopiques devaient être basés sur les descripteurs spatiaux micrométriques les plus pertinents vis à vis de l'activité biologique. Ce travail a permis d'aboutir à un cadre original pour le choix de descripteurs macroscopiques et a suggéré plusieurs pistes pour prédire la minéralisation à partir de ces descripteurs en s'affranchissant de la complexité spatiale. Initialement au sein du projet, les descripteurs macroscopiques pressentis étaient de nature physique et basés sur l'accessibilité des microorganismes aux molécules organiques, tels que des descripteurs d'hétérogénéité spatiale (facteurs de connectivité, facteurs de tortuosité...). En modélisant les concentrations de solutés organiques perçues par les bactéries (exposition), ce travail a montré que la pertinence des descripteurs physiques était généralement indissociable de critères biologiques. Plus précisément, les résultats de cette thèse ont montré que les descripteurs de type « distances » n'étaient utiles que s'ils étaient associés à des descripteurs de type « traits métaboliques bactériens ». En pratique, lorsque la minéralisation est dominée par des bactéries oligotrophes, comme c'est souvent le cas pour les micropolluants du sol nul, la distance entre bactéries joue un rôle plus important encore que la distance entre les bactéries et l'origine de la matière organique, en raison du rôle limitant de la compétition intra-populationnelle. La minéralisation dépend ainsi de ces deux distances, qu'il est possible de déduire à partir des processus de transport dispersif auxquels le sol est soumis. En particulier, dans un sol nu homogène, les coefficients de diffusion effective des solutés et d'advection-dispersion effective des bactéries permettent d'approcher les distances « bactéries-bactéries » et « bactéries-origine du substrat » et de prédire, conjointement avec le caractère oligotrophique des bactéries, l'efficacité de la minéralisation.

Éléments factuels

Cette thèse a donné lieu à un article [[preprint bioRxiv](#), [article publié](#)] soumis à publication dans *Soil Biology and Biochemistry*, ainsi que plusieurs contributions dans des congrès nationaux et internationaux :



SOILORGANICMATTER

6th international Symposium on Soil Organic Matter 2017 (SOM2017) à Harpenden (UK)

- Présentation d'un poster [[lien](#)]



4^e congrès du Réseau Matière Organique (ResMO2018) à Trégastel (Fr)

- Présentation orale



European Geosciences Union conference (EGU2018) à Vienne (At)

- Présentation d'un poster [[lien](#)]



Workshop MicroSoil2018 à Saint-Loup Lamairé (Fr)

- Présentation d'un poster



Computational Methods in Water Resources (CMWR2018) à Saint-Malo (Fr)

- Présentation orale



2nd conference from International Soil Modeling Consortium (ISMC2018) à Wageningen (NL)

- Présentation d'un poster [[lien](#)]



European Geosciences Union conference (EGU2019) à Vienne (At)

- Présentation d'un poster [[lien](#)]



Journées scientifiques de l'école doctorale EGAAL 2019 à Rennes (Fr)

- Présentation d'un poster

Cette thèse et les nombreuses discussions qu'elle a apportées m'ont permis de me former à la thématique du carbone organique des sols, ainsi qu'à l'approche « fondamentale » de la recherche. Cette thèse m'a aussi donné l'opportunité de suivre de nombreuses formations scientifiques (processus micrométriques dans le sol, services écosystémiques, programmation, planification expérimentale) ainsi qu'en éthique de la recherche, en enseignement, en communication scientifique, et m'a donné la possibilité de m'investir dans l'organisation d'évènements de rencontre entre grand public et scientifiques.

Table des matières

Remerciements	v
Préambule – Contexte et réalisation de la thèse.....	xi
Présentation de la thèse	xi
Contributions externes et collectives	xi
Fondations	xi
Collaborations et discussions.....	xii
Contribution de cette thèse au projet ANR <i>Soilμ3D</i>	xii
Éléments factuels.....	xiii
Table des matières	15
Table des figures.....	21
Table des tableaux.....	27
Lexique.....	28
<i>I</i> Introduction générale	33
I.1. Importance du carbone organique dans les sols	33
I.1.1. Rétention et remédiation des polluants par les sols	35
I.1.2. Emission et séquestration du carbone atmosphérique par les sols	36
I.1.3. Qualité agronomique des sols.....	37
Points clés.....	39
I.2. Connaissance des mécanismes liés aux aspects spatiaux	40
I.2.1. Émergence de l'étude des mécanismes fondamentaux spatiaux à l'œuvre dans les sols	40
I.2.2. Discussion sur la prise en compte des répartitions spatiales dans la dégradation du carbone organique du sol	44
I.2.3. Rôle de la modélisation sur la question de la spatialité.....	48

I.2.4. Choix du système d'étude	52
Points clés	54
I.3. Problématiques de la thèse	55
<i>Résumé du chapitre I</i>	57
II Travaux préliminaires	59
II.1. Présentation des expériences et du modèle initial	59
Points clés	68
II.2. Analyses préliminaires des données expérimentales	69
II.2.1. Mobilité des espèces.....	69
II.2.2. Modalités de transport du substrat et des bactéries	71
II.2.3. Incertitude sur la vitesse maximale globale de minéralisation	75
Points clés	77
II.3. Conception et exploration des modèles de transport.....	78
II.3.1. Modèle eulérien simple d'advection	78
II.3.2. Rôle restreint du modèle de transport	82
Points clés	82
II.4. Mise en cause du rôle potentiel de l'interaction entre la spatialité et les traits biologiques bactériens	83
II.4.1. Mise en évidence de la difficulté à reproduire les données	83
II.4.2. Exploration et élimination des scénarios alternatifs	87
Points clés	92
II.5. Mise en place du code MATLAB et résolution des problèmes.....	93
II.5.1. Choix d'un modèle de transport simplifié	93
II.5.2. Nécessité d'adapter la résolution numérique des équations de bioréaction.....	93
II.5.3. Seuil de concentration en substrat pour contraindre la vitesse spécifique de croissance	94
II.5.4. Linéarisation du système d'équations différentielles	96
II.5.5. Résolution numérique par MATLAB et temps de calcul	97
Points clés	97
<i>Résumé du chapitre II</i>	97

III	Contributions	99
III.1.	Contribution principale : « <i>Competition within low-density bacterial populations as an unexpected factor regulating carbon decomposition in bulk soil</i> ».....	99
III.1.1.	Présentation de l'article	99
III.1.2.	Manuscrit (Préprint)	100
III.1.3.	Matériel supplémentaire	134
III.1.4.	Compléments sur les traits d'histoire de vie	159
III.1.5.	Localisation de la dégradation.....	164
III.1.6.	Cas d'une communauté bactérienne mixte.....	173
	Points clés.....	176
III.2.	Compléments sur l'originalité des résultats	177
III.2.1.	Compétition intra-populationnelle dans les sols	177
III.2.2.	Densités de population et compétition locale	179
	Points clés.....	185
III.3.	Compléments sur le modèle de transport réactif	186
III.3.1.	Découplage advection-dispersion : impact de la lixiviation des bactéries	186
III.3.2.	Impact de l'anisotropie de la dispersion	189
III.3.3.	Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat	192
III.3.4.	Répartitions spatiales des bactéries et du substrat.....	195
	Points clés.....	197
III.4.	Compléments sur la ratio-dépendance	198
III.4.1.	Originalité de la ratio-dépendance dans les sols	198
III.4.2.	Unification de la compétition modélisée par les modèles de Monod et de Contois	199
III.4.3.	Interrogations futures sur l'apport explicatif du modèle de Contois.....	202
	Points clés.....	203
	<i>Résumé du chapitre III</i>	204
IV	Généralisations	205
IV.1.	Temporalité de l'optimum de dispersion	205
IV.1.1.	Comportement temporel asymptotique de l'optimum de dispersion.....	205

IV.1.2. Comportement transitoire de l'optimum de dispersion.....	208
IV.1.3. Comparaison avec le modèle de Contois	210
IV.1.4. Généralisation aux dispersions bactériennes continues de type diffusion.....	212
Points clés.....	215
IV.2. Impact de la diffusion du substrat sur le rôle de la dispersion des bactéries	216
IV.2.1. Etude en conditions de dispersion continue des bactéries : 3 régimes.....	216
IV.2.2. Etude en domaine spatial élargi : 2 régimes.....	217
IV.2.3. Modulation du rôle de l'efficacité d'absorption par la diffusivité du substrat..	220
Points clés.....	223
IV.3. Formalisation analytique de la compétition	224
IV.3.1. Difficultés à l'étude analytique.....	224
IV.3.2. Maximisation de l'exposition des bactéries au substrat lorsque la diffusion est négligeable en absolu	229
IV.3.3. Maximisation de l'exposition des bactéries au substrat lorsque la diffusion est négligeable relativement à la dégradation.....	234
Points clés.....	236
IV.4. Généralisation spatiale.....	237
IV.4.1. Impact de la concentration initiale en substrat	237
IV.4.2. Impact de la finitude de la source de substrat.....	243
IV.4.3. Extrapolation à partir d'un système spatial unitaire.....	250
IV.4.4. Échelle spatiale de la compétition pour le substrat	252
IV.4.5. Généralisation aux répartitions disjointes.....	256
Points clés.....	259
<i>Résumé graphique du chapitre IV.....</i>	<i>260</i>
V Perspectives	263
V.1. Relations entre l'impact de la densité bactérienne et certains phénomènes clés dans les sols	263
V.1.1. Effet d'amorçage (<i>priming effect</i>)	264
V.1.2. Effect Birch.....	264
V.1.3. Vitesse d'écoulement et dénitrification dans les bassins versants.....	265
Points clés.....	267

V.2. Application du modèle de transport réactif à l'étude d'autres problématiques	268
V.2.1. Application à l'intermittence temporelle des apports de substrat.....	268
V.2.2. Géométries réalistes des films d'eau	272
Points clés.....	275
V.3. Effets cumulatifs ou concurrents des autres processus spatiaux	276
Points clés.....	276
<i>Résumé du chapitre V</i>	277
Conclusion générale	279
Bibliographie	283

Table des figures

Figure I.1. Illustration du carbone organique dans le sol et de quelques facteurs-clés impliqués dans sa formation et son stockage.....	35
Figure I.2. Image d'un agrégat de sol de 0.5 mm de long obtenue en microscopie électronique à balayage.....	38
Figure I.3. Relations entre biomes, stocks de carbone du sol et abondance en microorganismes.	43
Figure I.4. Relation de Blackman entre l'activité d'une population et la présence du facteur limitant.....	50
Figure I.5. Modèle de Monod - Relation entre la concentration en substrat et la vitesse d'absorption	52
Figure I.6. Formule topologique de la molécule de 2,4-dichlorophénoxyacétique.....	54
Figure II.1. Principaux traitements expérimentaux mis en place.....	60
Figure II.2. Bilan de l'évolution de la teneur en eau.	62
Figure II.3. Production cumulée de CO ₂ mesurée dans les expériences de Pinheiro et al., (2018, 2015).	62
Figure II.4. Schéma du modèle bioréactif développé par (Babey et al., 2017).	65
Figure II.5. Minéralisation prédite pour l'expérience disjointe avec percolation, en absence de mécanismes dispersifs.	66
Figure II.6. Répartitions millimétriques finales des bactéries dégradantes du 2,4-D, dans l'expérience hétérogène colocalisée.....	70
Figure II.7. Quantités de ¹⁴ C initial lessivées pour chaque répartition initiale de substrat (<i>S</i> , en rouge) et de bactéries (<i>B</i> , en vert).....	73
Figure II.8. Carte de répartition des densités de copies de gènes <i>tfdA</i> (A) et du ¹⁴ C-2,4-D (B) pour l'expérience colocalisée avec percolation, au jour 24.....	75
Figure II.9. Scénarii possibles de minéralisation sur l'expérience homogène avec percolation.	76

Figure II.10. Représentation de la vitesse maximale globale de minéralisation comme dérivée de la minéralisation en fonction du temps au point d'inflexion de la courbe temporelle de minéralisation.....	77
Figure II.11. Modèle d'advection eulérienne plan par plan.....	79
Figure II.12. Dynamiques d'évolution de la quantité totale de substrat (A), de la minéralisation (B) et de la masse totale de dégradeurs bactériens (C) en fonction du coefficient de partition, pour les expériences colocalisée et disjointe avec percolation.....	81
Figure II.13. Performances prédictives de trois jeux de paramètres caractéristiques.	84
Figure II.14. Modélisation simplifiée de la dispersion.....	85
Figure II.15. Illustration de l'impact de la dispersion initiale des bactéries et du substrat pour cinq jeux de paramètres.	86
Figure II.16. Comparaison des expériences de Shi et al. (2021) (A) et des expériences de Pinheiro et al. (2018, 2015) utilisées dans cette thèse (B) et rôle opposé de la dispersion..	88
Figure II.17. Concentrations perçus en substrat et vitesse de croissance associée, dans l'expérience colocalisée hydrostatique.	89
Figure II.18. Dynamique des concentrations en substrat, à différentes distances de la position initiale, pour l'expérience colocalisée avec percolation, en absence de dégradation bactérienne.....	90
Figure II.19. Exemple de croissance exponentielle du temps de calcul, et différence de comportement selon le solveur MATLAB.	95
Figure III.1. Traits d'histoire de vie des modèles de Monod calibrés sur les données expérimentales de Pinheiro et al. (2018, 2015).	160
Figure III.2. Traits d'histoire de vie des modèles de Contois calibrés sur les données expérimentales de Pinheiro et al. (2018, 2015).	160
Figure III.3. Traits d'histoire de vie des modèles de Monod calibrés sur les données expérimentales.....	161
Figure III.4. Traits d'histoire de vie des populations copiotrophes et oligotrophes « modèles » modélisées avec un modèle de Monod.	163
Figure III.5. Dynamiques de minéralisation prédites avec le modèle de Monod pour les jeux de paramètres représentant des bactéries copiotrophes (A) et oligotrophes (B) « modèles ».	164

Figure III.6. Localisation des flux de carbone à travers les émissions de CO ₂	165
Figure III.7. Localisation des flux de carbone à travers la dynamique des bactéries.....	168
Figure III.8. Localisation des flux de carbone à travers la dynamique du CO ₂ (A, B) et des bactéries (C, D), pour les bactéries copiotrophes (A, C) et oligotrophes (B, D) « modèles ».	169
Figure III.9. Représentation graphiques de deux situations opposées en termes d'impact de la dispersion.....	172
Figure III.10. Dynamiques de minéralisation prédites avec le modèle de Monod dans le cas d'une communauté bactérienne mixte combinant deux populations copiotrophes ou oligotrophes, dans le cas de l'expérience colocalisée en percolation.....	174
Figure III.11. Dynamiques des deux populations modélisées conjointement dans l'expérience colocalisée avec percolation.....	175
Figure III.12. Profil spatial de concentrations en substrat et en bactéries.	180
Figure III.13. Représentation schématique de la répartition de points dans l'espace, selon deux agencements spatiaux, pour une même densité globale de population.....	182
Figure III.14. Impact de la lixiviation des bactéries sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation.....	187
Figure III.15. Capacité prédictive du modèle de Monod pour le traitement colocalisé avec percolation, selon un taux de lixiviation des bactéries nul (orange), égal au double de celui du substrat (violet), ou égal à celui du substrat (bleu).....	188
Figure III.16. Capacité prédictive du modèle de Contois pour le traitement colocalisé avec percolation, selon un taux de lixiviation des bactéries nul (orange), égal au double de celui du substrat (violet), ou égal à celui du substrat (bleu).....	188
Figure III.17. Impact de l'anisotropie de la dispersion hydrodynamique du substrat et des bactéries sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation.	190
Figure III.18. Capacité prédictives des modèles en fonction de l'anisotropie de la dispersion hydrodynamique.....	191
Figure III.19. Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation.	192

Figure III.20. Capacité prédictive du modèle de Monod pour le traitement colocalisé en percolation, selon la présence (axe marron des abscisses) ou l'absence (axe vert des ordonnées) de dispersion hydrodynamique du substrat.	194
Figure III.21. Capacité prédictive du modèle de Contois pour le traitement colocalisé en percolation, selon la présence (axe marron) ou l'absence (axe vert) de dispersion hydrodynamique du substrat.	194
Figure III.22. Carte de répartition spatiale des densités en bactéries (A) et des concentrations en substrat (B) avec le modèle de Monod calibré en hydrostatique et en percolation, pour l'expérience « colocalisé ».	196
Figure III.23. Carte de répartition spatiale des densités en bactéries (A) et des concentrations en substrat (B) avec le modèle de Contois calibré en hydrostatique et en percolation, pour l'expérience « colocalisé ».	197
Figure III.24. Impact de la concavité vers le bas de la relation de Contois dans différentes situations.	201
Figure III.25. Dépendance de la minéralisation au jour 24 envers le coefficient de dispersion, en fonction de la vitesse maximale d'absorption spécifique et de la constante de Contois.	202
Figure IV.1. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Monod. Les relations sont montrées pour chaque jour, de 1 à 40, indiqués par l'échelle couleur.	207
Figure IV.2. Effet de l'étendue du domaine spatial.	209
Figure IV.3. Effet de l'efficacité maximale d'absorption sur la rétrogradation temporelle de l'optimum de dispersion.	210
Figure IV.4. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Contois.	211
Figure IV.5. Variation temporelle de l'optimum de dispersion pour les modèles de Monod et de Contois, avec lixiviation des bactéries.	212
Figure IV.6. Comparaison de la dynamique temporelle de l'optimum de dispersion entre les modèles de Monod et de Contois, dans le cas d'une dispersion continue de type diffusion.	214
Figure IV.7. Evolution de l'optimum de dispersion des bactéries en fonction du coefficient de diffusion du substrat, dans le domaine spatial standard utilisé dans la section III.1.2, pour	

les jeux de paramètres biologiques calibrés en hydrostatique seulement (A) et en hydrostatique & percolation (B).	217
Figure IV.8. Evolution de l'optimum de dispersion en fonction du coefficient de diffusion du substrat, dans un domaine spatial élargi, pour les jeux de paramètres biologiques calibrés en hydrostatique seulement (A) et en hydrostatique & percolation (B).....	219
Figure IV.9. Minéralisation maximale en fonction de la diffusivité du substrat.	221
Figure IV.10. Profils spatiaux de concentrations en substrat et bactéries dans trois états stationnaires différents.	226
Figure IV.11. Définition du profil initial de substrat utilisé dans la démonstration.	228
Figure IV.12. Profils de bactéries nécessaires pour aplanir le profil de substrat en fonction du coefficient de diffusion.....	230
Figure IV.13. Représentation graphique des solutions de l'Éq 63.....	235
Figure IV.14. Relations entre l'étalement optimal des bactéries et le coefficient de diffusion du substrat.	236
Figure IV.15. Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat sur la minéralisation à 24 jours en fonction de la concentration initiale en substrat $S(t=0)$, pour l'expérience colocalisée en percolation.....	239
Figure IV.16. Impact de la concentration initiale en substrat sur la dispersion optimale des bactéries.....	240
Figure IV.17. Impacts couplés de la concentration initiale en substrat et des paramètres biologiques.	242
Figure IV.18. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Monod avec un domaine élargi	244
Figure IV.19. Compléments sur l'aspect temporel des impact de la dispersion des bactéries sur la performance de minéralisation (A) et sur la précocité de la minéralisation (B), en fonction de la nature ponctuelle ou permanente de la source de substrat.....	245
Figure IV.20. Visualisation des paramètres biologiques, pour les quatres jeux de paramètres caractéristiques mis en avant dans cette sous-section.....	246
Figure IV.21. Bilans de masse de carbone (A1, B1, C1) et profils spatiaux de concentration en substrat et de densité de bactéries (A2, B2, C2).....	249

Figure IV.22. Convergence du profil spatial de densité bactérienne pour des bactéries oligotrophes.....	249
Figure IV.23. Illustration de l'influence de l'agrandissement du domaine spatial sur l'optimum de dispersion des bactéries.	251
Figure IV.24. Profils spatiaux de concentration en substrat soumise à diffusion et dégradation, dans différents systèmes spatiaux.....	254
Figure IV.25. Répartitions spatiales initiales du substrat et des dégradeurs bactériens. ...	257
Figure IV.26. Impact de l'éloignement des localisations initiales de bactéries et du substrat sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour quatre jeux de paramètres caractéristiques	258
Figure IV.27. Proposition de représentation illustrative du micro-environnement du sol et des stratégies bactériennes.....	260
Figure V.1. Etapes de la minéralisation de l'azote organique et de la dénitrification.	266
Figure V.2. Représentation des différentes strates au sein du sol.....	266
Figure V.3. Aperçu conceptuel des mésocosmes du projet « <i>Microbial Catchment</i> ».....	267
Figure V.4. Bilans de masse de carbone totale suivant différents degrés d'intermittence de l'apport en substrat, pour le jeu de paramètres biologiques des oligotrophes modèles. ...	270
Figure V.5. Bilans de masse de carbone totale suivant différents degrés d'intermittence de l'apport de substrat.....	272
Figure V.6. Géométrie des pores et des répartitions de l'eau et de l'air à différentes teneur en eau.....	273
Figure V.7. Scénarios d'impact de la géométrie.....	274

Table des tableaux

Tableau 1. Conditions expérimentales pour chaque expérience.	63
Tableau 2. Valeurs calibrées des paramètres du modèle de transport bioréactif basé sur les expériences hydrostatiques (Babey et al., 2017).	67
Tableau 3. Bilan des types de limitations dans les deux situations caractéristiques illustrées par les deux calibrations.	170
Tableau 4. Correspondances entre les valeurs de densité bactérienne et la distance entre bactéries plus proches voisines.	185
Tableau 5. Valeurs des paramètres utilisées dans le criblage de la concentration initiale en substrat.	238

Lexique

Absorption bactérienne : Capture d'un substrat dissout par les cellules bactériennes. Employé dans un sens similaire à celui de « consommation ».

Advection : Transport de particules mobiles (solutés ou bactéries) dû au mouvement d'écoulement en masse du solvant (eau). Dans ce travail, le terme d'advection (effective) est réservé à la composante du mouvement d'un ensemble de particules caractérisée par un déplacement conjoint de son centre d'inertie et de chaque particule. La composante du mouvement caractérisée par un étalement sans déplacement du centre d'inertie est, quant à elle, désignée par le terme de dispersion (effective). L'advection microscopique désigne le mécanisme microscopique d'écoulement du solvant dans les pores du milieu. Elle est à l'origine à la fois de la dispersion et de l'advection effectives macroscopiques des particules.

Affinité (d'un microorganisme pour son substrat) : voir **Efficacité spécifique maximale d'absorption**

Agrégat : Les agrégats de sol sont des amas de particules minérales et organiques liées entre elles par des agents de cimentation, ce qui leur confère une certaine stabilité mécanique et permet leur séparation granulométrique par tamisage. Ce formalisme est issu de la capacité du sol à se fragmenter sous l'effet d'actions mécaniques et hydriques. L'utilisation de ce concept tend à se modérer, d'une part car la fragmentation d'un sol en agrégats est dépendante de la méthode de fragmentation en plus des propriétés intrinsèques du sol, d'autre part parce qu'il est difficile de relier la granulométrie d'un sol aux propriétés des habitats bactériens. Ces derniers sont mieux caractérisés par la description des pores (Kravchenko et al., 2019c).

Biofilm : Groupe de cellules agglomérées au sein d'une matrice d'exopolymères, qui peut être attachée à une surface ou sous forme de particule en suspension (*floc*) dans le milieu liquide. Ces exopolymères sont des biomolécules (protéines, polysaccharides etc.) sécrétées généralement par les microorganismes du biofilm et sont capables de former un gel aqueux. Les biofilms bactériens présentent des organisations spatiales complexes façonnées par des mécanismes d'interactions intercellulaires nombreux et variés (sécrétion de biens communs, sécrétion de substances létales, *quorum sensing*, *competition sensing*, adhésion sélective, façonnage de la structure et de la composition du biofilm etc.). Dans ce travail, le terme biofilm sera employé dans le même sens que « biocluster », c'est-à-dire de manière générique pour désigner des cellules bactériennes agglomérées au sein d'une matrice, en incluant le fait qu'en réalité les structures d'agglomération des bactéries peuvent prendre

des formes très variées (biofilms *stricto sensu*, (micro)colonies, floccs, « *slimes* », « tapis bactériens », « *zoogleas* » etc.)

Chimiotaxie : Capacité des cellules à diriger leur mouvement en fonction de gradients de concentrations de certains solutés.

Compétition : La compétition entre bactéries désigne la rivalité entre individus bactériens pour tirer profit d'une ressource commune limitée. Dans ce travail, le terme de « compétition pour le substrat » sera utilisé pour décrire des situations dans lesquelles l'activité concurrente des bactéries a un effet limitant sur la minéralisation globale, c'est-à-dire des situations où la minéralisation pourrait potentiellement être augmentée si la compétition entre bactéries était modifiée. En ce sens, le terme de compétition utilisé dans cette thèse inclut une dimension spatiale, et s'applique à des situations où des zones à forte compétition côtoient des zones à faible compétition, se traduisant plus généralement par une opposition entre le gradient de concentrations en substrat et le gradient de densités de population bactérienne.

Dégradeurs, décomposeurs : Termes utilisés pour désigner spécifiquement les microorganismes capables de dégrader une molécule donnée (par exemple un micropolluant de type pesticide), ou plus généralement de décomposer la matière organique complexe présente. « Décomposeurs » est le terme utilisé classiquement lorsqu'il est question de la dynamique du carbone du sol.

Densité de population : Concentration d'une population bactérienne. Le terme « densité » est utilisé pour marquer la distinction avec les concentrations en substrat, désignées simplement par le terme « concentration ».

Dispersion : Transport à l'origine de l'étalement dans l'espace d'un ensemble de particules mobiles (solutés ou bactéries), c'est-à-dire processus par lequel les particules s'écartent de leur ensemble de départ sans déplacement de son centre d'inertie (barycentre de masses). Dans ce travail, une distinction est faite entre deux composantes du mouvement d'un ensemble de particules, selon que son centre d'inertie reste immobile (transport qualifié de dispersion) ou se déplace comme chaque particule (transport qualifié d'advection). La combinaison des deux mouvements est qualifiée d'advection-dispersion. La diffusion moléculaire est l'un des deux mécanismes microscopiques à l'origine de la dispersion des solutés. Le deuxième mécanisme microscopique est l'advection microscopique, c'est-à-dire l'écoulement de la solution dans les pores, qui entraîne une dispersion des solutés mais généralement aussi un déplacement de leur centre d'inertie. Dans le cas de bactéries, seule la dispersion causée par advection microscopique, qualifiée de dispersion hydrodynamique, est observable, car les bactéries ont une masse trop importante pour être significativement affectées par l'agitation moléculaire thermique à l'origine de la diffusion moléculaire. Toute dispersion tend à homogénéiser les répartitions spatiales.

Écosystème : Communauté d'êtres vivants en interaction, généralement étroite, avec son environnement. Le terme d'écosystème peut s'appliquer à toutes les échelles, les limites des écosystèmes étant relatives. Tous les écosystèmes terrestres sont en effet interconnectés et forment la **biosphère**.

Efficacité spécifique maximale d'absorption : Terme donné dans ce travail à la grandeur $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ du modèle de Monod (voir également section I.2.3.2) et désignant le taux d'absorption spécifique des bactéries $(1/y) \cdot \mu$ rapporté à la concentration en substrat lorsque cette dernière tend vers zéro, ou en d'autres mots la capacité maximale de chaque cellule à capturer toute molécule de substrat entrant en contact avec sa membrane (Button, 1978). Cette grandeur, ainsi que la grandeur associée μ_{max}/κ_M , sont parfois désignées sous le terme « d'affinité spécifique » (Button, 1983; Sommer, 1986; Button et al., 2004). Cet usage n'a pas été retenu dans ce travail pour éviter toute confusion avec la grandeur κ_M qui est couramment désignée par le terme de « constante d'affinité ». Cette dernière sera quant à elle désignée dans ce travail sous le terme classique de « constante de saturation ». Le terme « spécifique » signifie que l'efficacité est exprimée par unité de bactéries (massique, numéraire ou autre). Au cours de ce document, ce terme sera souvent omis pour raccourcir l'expression.

Étalement : Résultat de la dispersion de particules mobiles (solutés ou bactéries). L'étalement (*spreading*) peut être décrit de plusieurs manières, notamment : i) par l'étendue maximale couverte par les particules, de manière absolue ou relative à son centre d'inertie ; ii) par la moyenne quadratique des distances entre le centre d'inertie et chacune des particules. Dans le cas d'une répartition normale, cet étalement moyen quadratique est égal à l'écart-type de la loi normale, soit \sqrt{ndt} avec n le nombre de dimensions, d le coefficient de dispersion à l'origine de l'étalement, et t la durée de la dispersion.

Exoenzymes : Enzymes secrétées par les cellules et dont la vocation est de catalyser des réactions extracellulaires, par opposition aux enzymes intracellulaires, appelées endoenzymes. Les endoenzymes libérées dans l'environnement à la mort des cellules ne sont généralement pas désignées par le terme d'exoenzymes. Les enzymes membranaires peuvent parfois être classées comme exoenzymes.

Films d'eau : Le terme de « films d'eau » est utilisé fréquemment dans les sciences du sol pour désigner de manière générique la fraction aqueuse au sein d'un sol, souvent retenue par capillarité dans les micropores sous forme de ménisques de taille micrométrique (Young et al., 2008). Ce terme sera employé dans ce travail de la même manière, sans se restreindre à son sens physique qui désigne plus spécifiquement les films nanométriques constitués par les quelques couches de molécules d'eau adsorbées à la surface des particules solides (Ebru, 2020).

Latence : Temps qui s'écoule entre l'introduction d'un substrat et l'apparition de la réponse bactérienne. Cette phase de latence (*lag phase*) est souvent expliquée par le temps nécessaire aux cellules pour s'adapter à des nouvelles conditions environnementales, ainsi que par une surestimation de la population initiale viable.

Minéralisation : Désigne l'étape finale (ou l'ensemble du processus) de dégradation d'une molécule organique, au cours de laquelle cette dernière sera oxydée en CO₂, convertissant ainsi le carbone organique en carbone minéral.

Motilité : Capacité des microorganismes à se déplacer activement, c'est-à-dire en consommant de l'énergie. La motilité fait appel à des mécanismes variés tels que la nage, le glissement (*sliding* et *gliding*), la traction (*twitching*), l'expulsion de matière, la contraction-extension, ou encore les mouvements de population (*swarming*). La motilité peut être aléatoire ou en réponse à des stimuli.

Oligotrophie/copiotrophie (stratégie écologique) : voir section III.1.4. Localisation de la dégradation.

Particulaire (carbone organique) : Définit le carbone organique présent sous forme de particules insolubles (résidus végétaux, débris cellulaires...), par opposition au carbone organique dissout. Le carbone organique particulaire se solubilise sous l'effet d'exoenzymes (hydrolases) et de déstabilisations physicochimiques.

Planctonique : Qualifie les bactéries en suspension dans l'eau, par opposition aux bactéries attachées aux surfaces ou au sein de biofilms. Les bactéries planctoniques peuvent être motiles ou non, mais sont malgré tout soumises aux mouvements d'eau dans le sol.

Population (sens écologique) : ensemble d'individus choisis en fonction de l'étude, dont on postule qu'ils peuvent se transférer du matériel génétique ou se reproduire entre eux de manière équiprobable, c'est-à-dire qu'ils appartiennent à la même espèce et qu'ils occupent un même espace géographique. La notion d'espèce en microbiologie s'évalue à partir de la similarité de la séquence des gènes d'ARNr 16S complétée par d'autres critères phénotypiques et chimiotaxonomiques (Oren and Garrity, 2014).

r/K (stratégie écologique) : Modèle évolutif, voir Encart 1. En écologie microbienne, les stratégies écologiques d'« oligotrophie/copiotrophie » et « r/K » sont souvent considérées comme semblables.

Substrat : Ressource abiotique utilisée par les microorganismes comme source d'énergie et/ou de matière. Dans ce travail, le substrat considéré est le 2,4-D, un pesticide utilisé comme source d'énergie et de matière par certains dégradeurs spécifiques.

Source (de substrat) : Dans cette thèse, le terme « source » est employé pour désigner de manière générique la position d'origine du substrat, que ce soit la localisation d'une masse initiale de substrat ou la localisation d'un apport permanent de substrat.

Taux d'accommodation : Paramètre d'adaptabilité utilisé dans l'expression du taux de croissance bactérienne avec retard, et prenant explicitement en compte l'effet « mémoire » des bactéries s'adaptant à des conditions environnementales changeantes (Patarinska et al., 2000).

Vitesse spécifique maximale de croissance (*maximum specific uptake rate*) : Terme désignant la grandeur μ_{max} du modèle de Monod et représentant le maximum de la vitesse spécifique de croissance μ , correspondant à la valeur de cette dernière lorsque la concentration en substrat tend vers l'infini. Le terme « spécifique » signifie que la vitesse est exprimée par unité de bactéries (massique, numéraire ou autre). Au cours de ce document, le terme « spécifique » sera souvent omis.

Nous n'héritons pas de la terre de nos parents, nous l'empruntons à nos enfants.

— Antoine de Saint-Exupéry

Le sol, c'est un patrimoine. Notre devoir est de le transmettre.

— Marc-André Sélosse

I Introduction générale

Ce chapitre positionne cette thèse par rapport à sa thématique. La première section présente le contexte scientifique et sociétal général qui justifie le sujet de cette thèse, en plus d'avoir alimenté mon intérêt pour celui-ci. La deuxième section dresse l'état des lieux des connaissances et des questionnements actuels qui nourrissent spécifiquement la thématique dans laquelle s'inscrit cette thèse.

I.1. Importance du carbone organique dans les sols

Tout organisme vivant est inclus au sein d'une communauté d'êtres vivants en interaction entre eux et avec leur environnement, qu'on qualifie d'écosystème, et dont il dépend (Daily, 1997). Par extension, toute société humaine est dépendante des fonctions assurées par son écosystème, lui-même dépendant du bon fonctionnement des autres écosystèmes et au final de la biosphère¹ toute entière. Le maintien des sociétés humaines repose sur le maintien des écosystèmes dans lesquels elles s'inscrivent, et au final sur le maintien du système Terre dans des conditions proches de celles qui s'appliquent aujourd'hui. Jusqu'aux XVII^e-XIX^e siècles, la biosphère est parue résiliente face à l'impact des activités anthropiques. La poursuite de l'intensification croissante de l'impact des activités anthropiques sur notre environnement depuis cette époque ne garantit plus nécessairement la stabilité de la biosphère et, en retour, sa capacité à soutenir nos sociétés (Rockström et al., 2009; Steffen et al., 2015). Cette situation exceptionnelle a conduit à qualifier la période actuelle d'Anthropocène, où l'influence de l'être humain est devenue une force géologique majeure (Lewis and Maslin, 2015). Au sein des écosystèmes, le **sol** est un élément central. Il est un constituant majeur de la « Zone Critique », la fine pellicule terrestre qui enveloppe notre planète depuis les roches altérées jusqu'à la basse atmosphère et qui abrite la quasi-totalité

¹ La biosphère rassemble la totalité des écosystèmes.

de la vie continentale. De fait, le concept de « santé des sols » (*soil health*), qu'on peut définir comme la capacité des sols à assurer leurs fonctions de manière durable, en particulier celles impliquant les organismes vivants (Janzen et al., 2021), n'a cessé depuis un quart de siècle d'occuper une place de plus en plus prépondérante dans les thématiques de recherches.

Parmi les fonctions assurées par les sols, Blum (2005) liste trois catégories de fonctions écologiques, la première étant la production de biomasse, indispensable à la Vie en général et assurant notamment l'approvisionnement des sociétés humaines en nourriture, énergie et matières premières organiques, la deuxième étant la protection/régulation de l'environnement de par le rôle des sols dans la plupart des cycles biogéochimiques (eau, carbone, azote etc.). Les sols apportent également aux sociétés humaines d'autres bienfaits, tels que les ressources issues de la biodiversité comme les antibiotiques ou les fonctions récréatives et culturelles, mais ces points ne seront pas abordés ici. Les fonctions remplies par les sols peuvent être évaluées en fonction de leurs bénéfices à l'égard de divers objectifs et divers acteurs (sociétés humaines, biosphère, etc.), et être alors qualifiées de « services écosystémiques » (Baveye et al., 2016). Lorsque l'on place les besoins humains comme objectif, les services écosystémiques rendus par les sols comptent parmi les plus essentiels car ils assurent la plupart des besoins humains fondamentaux de subsistance (nutrition, conditions sanitaires, logis, énergie) (O'Neill et al., 2018). Ce constat souligne l'importance d'assurer la pérennité des sols. Les besoins humains fondamentaux qui reposent sur l'usage des sols, et les indicateurs sociaux associés tels que la nutrition, l'espérance de vie en bonne santé, l'accès à l'énergie, pourraient théoriquement être atteints à l'échelle de la planète de manière durable, c'est-à-dire en préservant la biosphère indéfiniment. Certains pays se rapprochent d'ailleurs de cet équilibre, comme le Vietnam (O'Neill et al., 2018). Néanmoins cette situation fait figure d'exception, et l'usage des sols depuis les Révolutions Vertes jusqu'à nos jours n'a globalement pas suivi une évolution durable (Pingali, 2012), ce qui souligne d'autant plus l'importance de mieux comprendre les sols pour pouvoir mieux les gérer, dans un souci de préservation plutôt que d'intensification de leurs fonctions.

Plus précisément, au sein des sols, le **carbone organique (Figure I.1)** est impliqué dans la plupart des services écologiques et biochimiques fournies par les sols (Chenu et al., 2017), si bien que le carbone organique total du sol, défini généralement en pourcentage massique de matière sèche de sol (Jarvie, 1991), est l'indicateur de qualité de management des sols le plus ubiquitaire et le plus utilisé (Bünemann et al., 2018).

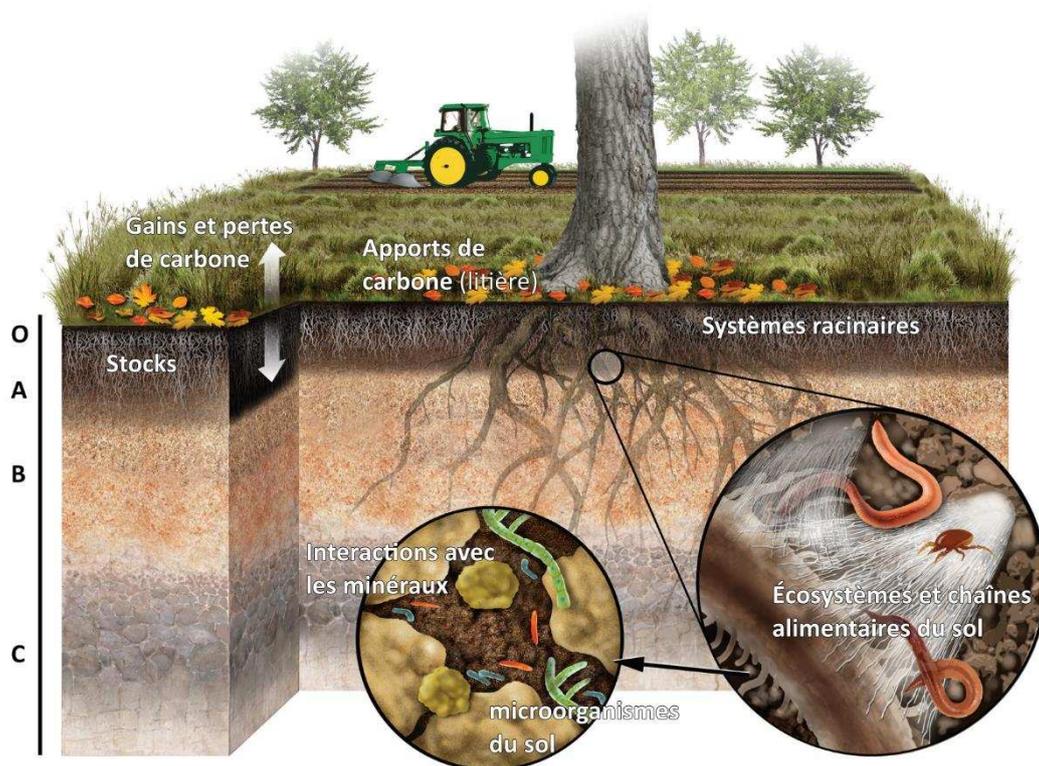


Figure I.1. Illustration du carbone organique dans le sol et de quelques facteurs-clés impliqués dans sa formation et son stockage. Cette figure illustre les apports de carbone au sol par la végétation, les chaînes alimentaires complexes dans le sol, à différentes échelles, ainsi que les facteurs abiotiques et minéraux interagissant avec le carbone organique. Les horizons du sol sont représentés par les lettres **O**, pour l'horizon organique en surface, **A**, pour la couche arable (organo-minérale) qui contient les plus hautes concentrations de matière organique partiellement décomposée, **B**, pour l'horizon minéral, et **C** pour l'horizon d'altération primaire de la roche-mère. Figure traduite de Jackson et al. (2017, Fig. 1).

Le cycle du carbone organique du sol est en effet au centre de nombreuses problématiques, en particulier celles du réchauffement climatique, de la remédiation des polluants organiques et de la qualité agronomique du sol.

I.1.1. Rétention et remédiation des polluants par les sols

Les services de dépollution fournis par le sol, incluant les processus de dégradation des pesticides, font partie intégrante de la résilience naturelle de l'environnement (Rockström et al., 2009). Les sols sont une interface-clé entre la pollution terrestre et les ressources en eau. Ils fournissent des services écosystémiques essentiels dans la dissipation des polluants (Blum, 2005). Au cours des 75 dernières années, les pesticides ont constitué une source croissante de pollution terrestre, engendrant des coûts pour les sociétés humaines qui pourraient dépasser les bénéfices (Bourguet and Guillemaud, 2016). Lors de l'infiltration de l'eau, une partie des pesticides percole à travers les sols. Ils peuvent y être partiellement dégradés sous des conditions bioréactives favorables, réduisant ainsi leurs conséquences

négatives sur les écosystèmes aquatiques récepteurs en aval (Arias-Estévez et al., 2008). Néanmoins, même pour des pesticides facilement biodégradables, leur usage excessif et répété peut dépasser les capacités de dégradation du sol et entraîner la rémanence du pesticide ou de ses produits de dégradation sur des périodes plus longues, augmentant les risques de dispersion dans l'environnement Merini et al. (2007). Les cultures intensives sont une source majeure d'utilisation d'intrants comme les pesticides. Au cours de ma thèse, l'enjeu de la dégradation des polluants organiques dans les sols a constitué le « point de départ » de la réflexion sur les couplages entre dégradation microbienne et processus spatiaux. Cet angle d'approche a ensuite évolué vers l'enjeu de la dégradation du carbone organique du sol en général, étroitement lié aux questions de réchauffement climatique et de qualité agronomique des sols.

I.1.2. Emission et séquestration du carbone atmosphérique par les sols

En dehors de l'hydrosphère, les sols sont connectés à un deuxième compartiment biogéochimique majeur de notre planète, l'atmosphère. L'atmosphère est soumise à l'accumulation anthropique de gaz à effet de serre, les deux productions qui contribuent le plus à l'effet de serre étant le CO₂ et le CH₄. Près d'un quart des émissions mondiales de CO₂, et la moitié des émissions de CH₄, proviennent des activités agricoles. Le CO₂ produit par l'être humain actuellement et dans les années à venir ne pourra pas être capturé ou assimilé en totalité par les compartiments biogéochimiques de notre planète (Falkowski et al., 2000). En effet, l'accumulation de carbone est beaucoup plus lente que les émissions anthropiques ou que l'incorporation de carbone dans la biomasse (Schlesinger, 1990), et l'ampleur potentielle d'un tel stockage du carbone dans les sols fait encore l'objet de débats. Néanmoins, de nombreux travaux suggèrent que les sols puissent ralentir l'élévation de la teneur en CO₂ atmosphérique (Fontaine et al., 2007; Rumpel et al., 2020). Dans tous les cas, l'incorporation de carbone dans les sols est nécessaire pour contrer les émissions de CO₂ directement dues à la minéralisation des stocks de carbone préalablement stabilisés dans les sols. Au Royaume-Uni, les émissions de gaz à effets de serre par les sols représentaient à la fin du 20^e siècle 0.6% du stock souterrain de carbone organique par an en moyenne (Bellamy et al., 2005). Stockmann et al. (2015) montrent une diminution des stocks de carbone organique du sol de 2001 à 2009 dans toutes les régions du monde, probablement due en grande partie au changement d'usage des sols. Cette estimation est en accord avec l'augmentation constante de la minéralisation microbienne des stocks de carbone organique observée de 1987 à 2016 par Lei et al. (2021).

La compréhension des interactions entre les stocks de carbone du sol et le changement climatique est ainsi très importante pour prédire le devenir du carbone organique. Les sols sont en effet en étroite interaction avec le changement climatique (Chenu and Chevallier, 2015), alors même qu'ils abritent un stock de carbone qui dépasse celui de l'atmosphère et de la biomasse en surface (Fontaine et al., 2007). Ce stock est issu de l'accumulation de carbone sur plusieurs milliers d'années du fait d'une minéralisation plus faible que le flux

d'apport de carbone au sol, voire parfois négligeable (Rumpel et al., 2002). La décomposition du carbone du sol est un processus complexe qui dépend de nombreux facteurs, incluant la teneur en carbone du sol elle-même (Wadman and de Haan, 1997). Au cours de sa décomposition, le carbone du sol subit de nombreuses transformations jusqu'à être au final minéralisé en CO_2 , cette dernière étape étant principalement gouvernée par l'activité des dégradeurs microbiens. Leur activité peut être restreinte lorsqu'une partie du carbone issu des plantes est trop pauvre en énergie pour assurer à elle seule la croissance et la maintenance de ses dégradeurs (Fontaine and Barot, 2005). Dans ce même travail, les auteurs montrent aussi par modélisation que les dégradeurs du carbone du sol pourraient également être réprimés par la concurrence de populations limitées par d'autres nutriments (azote par exemple). Toutes les questions en jeu dans cette thématique nécessitent encore au jour d'aujourd'hui d'améliorer la compréhension des facteurs déterminant le stockage du carbone dans le sol. Par ailleurs, le stockage de carbone dans le sol possède d'autres vertus.

I.1.3. Qualité agronomique des sols

L'importance du carbone organique du sol vis-à-vis de la qualité agronomique des sols est reconnue scientifiquement au moins depuis le début du XIX^e. L'intérêt porté au carbone organique du sol a diminué au cours du XX^e suite au développement des engrais minéraux de synthèse, mais a progressivement gagné à nouveau en reconnaissance depuis les années 1950 (Manlay et al., 2007).

Le carbone organique du sol joue un rôle de structuration du sol et de résistance aux dégradations physiques telles que l'érosion (Herrick and Wander, 1998). Le carbone organique du sol sert notamment de « ciment » en permettant l'agrégation des particules minérales du sol (Puget et al., 2000), comme l'illustre la **Figure I.2**, tout en favorisant l'infiltration de l'eau et la circulation de l'air entre ces agrégats (Chenu et al., 2017). Par ailleurs, le carbone organique du sol affecte les propriétés hydrauliques du sol telles que la conductivité hydraulique, la porosité ou la rétention d'eau (Rawls et al., 2004), l'eau étant au cœur de la plupart des fonctions biologiques du sol.

Enfin, la présence de carbone organique est inféodée à la présence de matière organique des sols, qui représente généralement, dans les systèmes naturels, la source principale d'une grande partie des nutriments essentiels à la croissance des végétaux (en premier lieu l'azote et le phosphore) (Foster and Bhatti, 2005; Tiessen et al., 1994). Plus précisément, la minéralisation des molécules organiques du sol fournit des nutriments minéraux essentiels à l'ensemble de la vie du sol, qui peuvent par ailleurs être adsorbés temporairement sur la matière organique elle-même qui contribue ainsi à la fertilité chimique du sol (Chenu et al., 2017), en plus de participer à la fertilité biologique en garantissant la présence d'organismes auxiliaires.

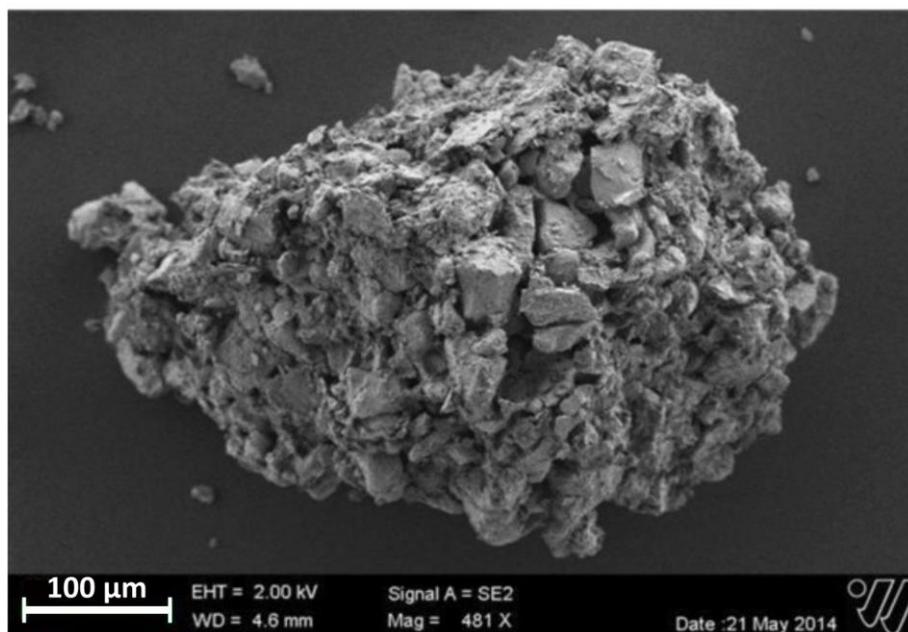


Figure I.2. Image d'un agrégat de sol de 0.5 mm de long obtenue en microscopie électronique à balayage. Figure adaptée de Totsche et al. (2018).

Les trois enjeux décrits précédemment revêtent une importance croissante, face à l'impact également croissant des activités humaines sur notre environnement. Notamment, l'impact anthropique sur le système Terre a déjà dépassé les limites planétaires en termes de changement climatique, de changement d'usage des sols, de flux biochimiques d'azote et de phosphore et d'intégrité de la biosphère (Steffen et al., 2015), ces aspects étant tous les quatre étroitement liés aux sols. La préservation du carbone organique des sols cultivés, et plus généralement la conciliation entre l'utilisation des sols cultivés et la résolution des trois grandes problématiques vues précédemment est au cœur de l'agroécologie, à la fois discipline scientifique, pratique agricole et mouvement sociétal (Wezel et al., 2009). De fait, à l'image de la réduction des risques associés aux pesticides (Möhring et al., 2020), les solutions à chacune de ces problématiques sont multidisciplinaires et doivent nécessairement englober toutes les parties prenantes de la société. Face à ces enjeux, la recherche scientifique remplit un rôle essentiel de compréhension et de prédiction du fonctionnement des systèmes complexes en jeu, donnant ainsi les clés pour se diriger vers des modes de société durables. Les trois points détaillés précédemment soulignent l'enjeu sociétal que représente le stockage du carbone dans les sols, faisant de la compréhension et de la restauration/amélioration de la teneur en carbone des sols des priorités scientifiques. La problématique de la dégradation de la matière organique s'est ainsi imposée dans la communauté scientifique travaillant sur le sol. Une partie de cette communauté s'attache à comprendre les mécanismes fondamentaux spatiaux qui déterminent le devenir du carbone organique dans les sols.

Points clés

- ▶ Le sol est au cœur des problématiques de réchauffement climatique, de production durable de nourriture et de pollution.
- ▶ Au regard de ces problématiques, l'essentiel des fonctions assurées par le sol impliquent le carbone organique du sol.
- ▶ Les mécanismes régissant le devenir du carbone organique du sol est un axe de recherche actuel très actif.

I.2. Connaissance des mécanismes liés aux aspects spatiaux

La recherche des mécanismes permettant d'expliquer le cycle du carbone dans les sols constitue une thématique de recherche foncièrement pluridisciplinaire, qui est abordée par de nombreuses disciplines aux approches très variées (par exemple, hydrodynamique des milieux poreux, écologie microbienne, géochimie organique, analyse mathématique, thermodynamique et bien d'autres). Des approches différentes se sont succédées au fil des années, pour aboutir depuis le début des années 2000 à un intérêt croissant pour, entre autres, les processus spatiaux aux échelles fines.

I.2.1. Émergence de l'étude des mécanismes fondamentaux spatiaux à l'œuvre dans les sols

Le cycle du carbone organique du sol est alimenté par la fixation du CO₂ atmosphérique par les organismes autotrophes, principalement les végétaux, et libère du CO₂ à travers la minéralisation du carbone organique par les organismes hétérotrophes, principalement les microorganismes (Lavelle and Spain, 2001). Le rôle des microorganismes dans le cycle du carbone organique du sol est établi depuis les débuts de l'écologie microbienne initiée par les travaux de Sergueï Nikolaïevitch Winogradski et de Martinus Willem Beijerinck à la fin du XIX^e siècle. L'activité des microorganismes minéralisant la matière organique du sol dépend principalement de la température du sol, de son pH et de la disponibilité en eau (et par corollaire en air) (Moyano et al., 2013; Chenu et al., 2017; Li et al., 2020). Ces trois facteurs sont des facteurs environnementaux qui reposent fondamentalement sur le climat et donc indirectement sur le biome¹. L'influence du biome, ou plus grossièrement de la latitude, est visible sur la répartition à l'échelle mondiale de la richesse en microorganismes du sol ou des stocks de carbones organiques dans le sol (**Figure I.3**). Néanmoins ces facteurs environnementaux à large échelle ne suffisent pas à expliquer la variabilité infrarégionale de la minéralisation (Hursh et al., 2017; Warner et al., 2019).

De nombreux modèles ont été développés pour prédire la minéralisation du carbone organique du sol, en incluant d'autres paramètres macroscopiques, tels que la complexité de la matière organique du sol, qualifiée de « récalcitrance chimique », la granulométrie du sol, la teneur du sol en matière organique et en biomasse microbienne, la diversité microbienne, etc. (Plante and Parton, 2007). Les modèles RothC (Skjemstad et al., 2004) et CENTURY (Kelly et al., 1997) comptent parmi les plus connus. Bien que couramment utilisés actuellement, ces modèles phénoménologiques², basés sur des hypothèses macroscopiques assez fortes, ne fournissent pas toujours des prédictions satisfaisantes, notamment lorsqu'ils sont appliqués à des systèmes différents de ceux pour lesquels ils ont été conçus et validés

¹ Un biome désigne un macroécosystème, c'est-à-dire un ensemble d'écosystèmes caractéristiques d'une aire géographique.

² Un modèle est qualifié de « phénoménologique » lorsque qu'il est basé sur des relations empiriques, sans description explicite des mécanismes fondamentaux.

(Smith et al., 1997; Falloon and Smith, 2006; Manzoni and Porporato, 2009). La minéralisation dans les sols apparaît peu dépendante, voire indépendante, de la diversité microbienne, ce qui est classiquement expliqué par l'importante redondance fonctionnelle au sein des communautés microbiennes du sol (Wertz et al., 2006; Juarez et al., 2013). La caractérisation de la diversité microbienne des sols par des approches métagénomiques s'est fortement développée depuis les années 1990 mais, en raison du manque de connaissances sur les localisations micrométriques des bactéries et de la difficulté à relier les données métagénomiques et l'activité des bactéries, le lien entre les données métagénomiques et les mécanismes dans le sol reste encore difficile à définir (Baveye et al., 2018). La minéralisation dans les sols apparaît également peu dépendante de la nature chimique de la matière organique. La matière organique du sol est un continuum de composés organiques à différents stades de décomposition (Lehmann and Kleber, 2015), depuis la matière organique initiale « complexe » généralement d'origine végétale jusqu'aux molécules simples en solution ou adsorbés aux particules du sol (Wagai et al., 2009). Bien qu'on puisse supposer que la durée de décomposition dépend de la complexité des composés organiques, il apparaît difficile d'établir une relation entre les propriétés intrinsèques des composés organiques et leur durabilité dans le sol (Dungait et al., 2012). Face à la capacité prédictive insuffisante des paramètres macroscopiques précédents, il a été identifié que la priorité pour faire gagner les modèles en précision, en fiabilité et en polyvalence était d'arriver à comprendre et à intégrer les mécanismes microscopiques (Manzoni and Porporato, 2009).

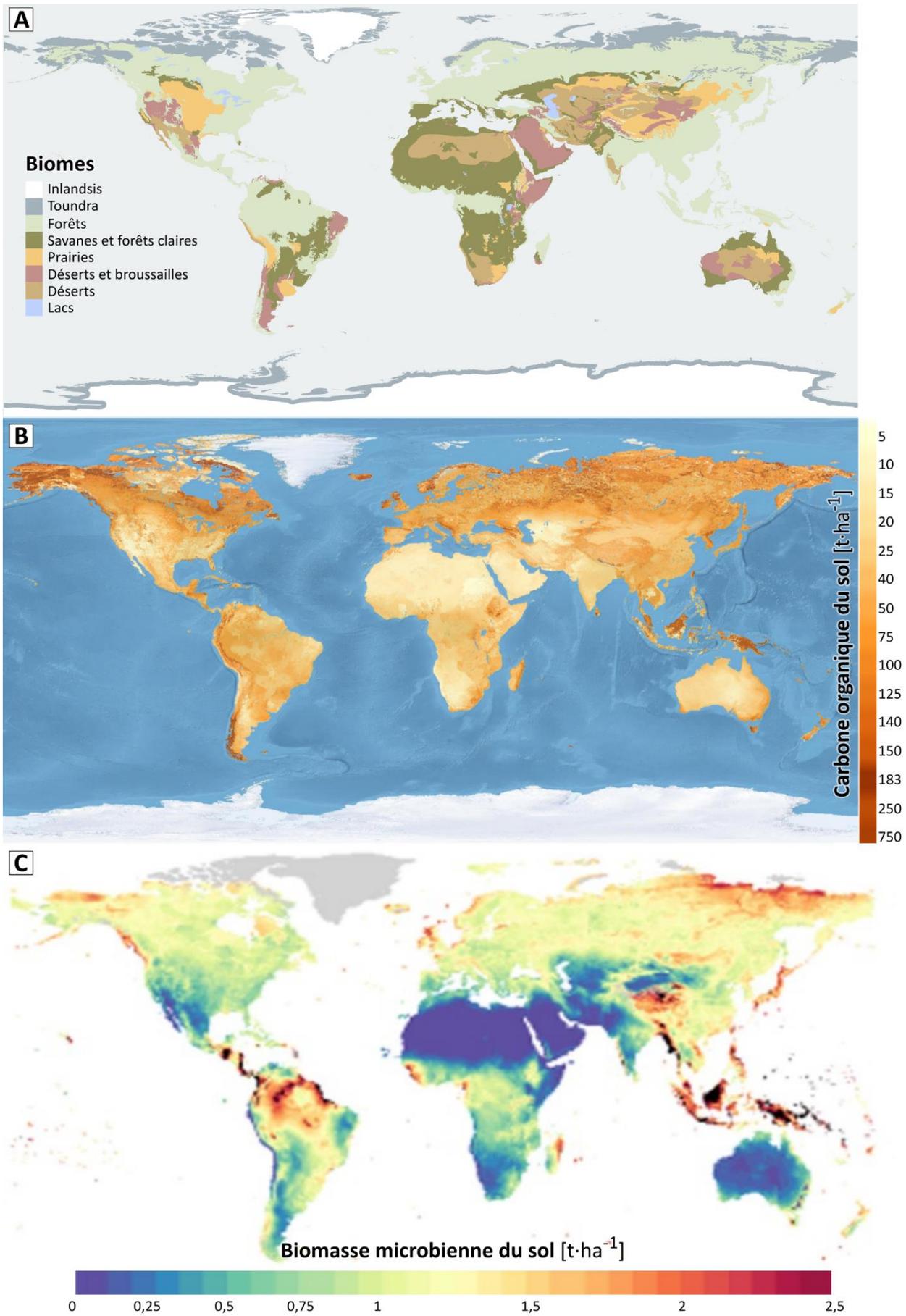


Figure I.3. Relations entre biomes, stocks de carbone du sol et abondance en microorganismes. La première carte (A) représente les principaux biomes (figure adaptée de Launchbaugh and Strand, simplifiant les écorégions définies par le *World Wildlife Fund's Conservation Science Program*). La deuxième carte (B) représente les stocks de carbones mesurés dans les 30 premiers cm des sols, en tonne de carbone par hectare (figure adaptée de la *Global Soil Organic Carbon Map* (FAO and ITPS, 2020)). La troisième carte (C) représente la masse de microorganismes du sol, en tonnes de carbone microbien par hectare également (figure adaptée de Serna-Chavez et al. (2013)).

Contrairement aux facteurs macroscopiques cités précédemment, la variabilité spatiale des processus du sol aux échelles plus fines que l'échelle de la parcelle n'a commencée à être véritablement étudiée que très tardivement, à partir du début des années 2000 (Dechesne et al., 2014). Les travaux des deux dernières décennies ont montré que les incertitudes qui limitent aujourd'hui les capacités prédictives des modèles de minéralisation du carbone du sol sont en grande partie dues à la grande variabilité spatiale des propriétés physiques, chimiques et biologiques du sol (Dubus et al., 2003). Le rôle des processus spatiaux a notamment été prouvé empiriquement par des expériences de broyage de sol entraînant une augmentation de la minéralisation (Balesdent et al., 2000). L'importance de la variabilité spatiale aux échelles fines impose de prendre en compte cette variabilité lors des mesures et des prédictions (Kühn, 2007) mais également d'identifier quels processus, parfois inattendus, peuvent émerger de cette variabilité spatiale.

La diffusion a été identifiée très tôt comme facteur limitant la minéralisation, parfois également appelée « limitation par transfert de masse » (Harms and Bosma, 1997; Cliff et al., 2002). Ces considérations ont amené à souligner l'importance des répartitions spatiales de la matière organique et des enzymes catalysant sa minéralisation, qu'elles soient présentes à l'extérieur comme à l'intérieur des cellules. Ainsi, de nombreuses études se sont questionnées sur la répartition et le rôle des enzymes présentes dans le milieu (Kravchenko et al., 2019a). En effet, l'approvisionnement en substrat de nombreux microorganismes du sol repose sur la sécrétion d'enzymes extracellulaires, qualifiées d'exoenzymes, dont l'action permet souvent d'hydrolyser la matière organique polymérisée insoluble du sol (*particulate organic matter*) ou de se défendre contre des organismes pathogènes ou des toxines. Les bactéries Gram-positives, les mycètes (*fungis*) et les racines sécrètent une grande portion de ces exoenzymes (Burns, 1982). Par ailleurs, les enzymes initialement intracellulaires ou membranaires peuvent être libérées à la mort des cellules et se retrouver en solution ou associées aux débris cellulaires ou aux particules minérales du sol. L'ensemble de ces enzymes extracellulaires n'exerce pas seulement une action de dépolymérisation, mais peut aussi exercer une action significative sur la minéralisation du carbone organique du sol, nommée EXOMET, du même ordre de grandeur que la minéralisation induite par les organismes vivants (Maire et al., 2013; Kéralval et al., 2018). En plus de leur localisation, le temps de demi-vie et l'activité de ces enzymes extracellulaires dépend étroitement de nombreux facteurs biophysicochimiques du sol, tels que le pH ou la teneur en certains

minéraux et espèces chimiques, conduisant à une variabilité spatiale potentiellement très importante et encore difficilement prédictible. Les études sur la spatialité des exoenzymes ont été amenées assez tôt à prendre en compte le rôle des traits métaboliques des organismes sécréteurs d'exoenzymes. Plusieurs études mettent en lumière les relations qui peuvent exister entre les stratégies des sécréteurs d'exoenzymes, la distance au substrat, la diffusibilité du substrat et l'organisation spatiale des communautés (Allison, 2005; Folse and Allison, 2012; Ebrahimi et al., 2019). En comparaison, dans les études portant sur la dégradation médiée cette fois par les cellules microbiennes et leurs enzymes endocellulaires, le rôle des traits biologiques n'a été que très rarement étudié, jusqu'à récemment (Pagel et al., 2020; Shi et al., 2021). En revanche, le rôle des répartitions spatiales des dégradeurs microbiens a fait l'objet d'un certain nombre de travaux.

En effet, la vision émergente depuis quelques années considère qu'il est crucial de connaître le rôle de la répartition spatiale des microorganismes et de la matière organique pour arriver à prédire le devenir du carbone dans les sols (Lehmann and Kleber, 2015; Chenu et al., 2017). Cette problématique représente un défi, de par la difficulté à mesurer *in situ* ces répartitions spatiales. L'hétérogénéité spatiale des répartitions de microorganismes a été mise en évidence à toutes les échelles mais demeure encore méconnue (Chenu et al., 2017). Les processus fondamentaux microbiens en jeu dans les sols demeurent les plus difficiles à caractériser à l'heure actuelle, par comparaison aux processus physiques et chimiques (Baveye et al., 2018). On peut relever par exemple qu'il n'existe encore aucune mesure *in situ* de la répartition 3D des bactéries à l'échelle micrométrique (Baveye et al., 2018), soit parce que la résolution des méthodes non invasives (comme la micro-tomographie) est encore trop basse, soit parce que les méthodes à haute résolution sont encore trop invasives (comme l'observation microscopique d'échantillons au préalable fixés dans du formaldéhyde, déshydratés et imprégnés de résine). La répartition des microorganismes est d'autant plus critique qu'il est vraisemblable que les microorganismes du sol, en particulier les bactéries, soient localisés de manière très hétérogène, conduisant probablement à un épuisement local du substrat aux endroits plus denses en microorganismes (Soulas and Lagacherie, 2001). Néanmoins, à la fois grâce aux expériences physiques et à la modélisation, la vision du rôle des répartitions spatiales microbiennes, notamment bactériennes, s'est beaucoup enrichie au cours des deux dernières décennies.

I.2.2. Discussion sur la prise en compte des répartitions spatiales dans la dégradation du carbone organique du sol

La distribution des bactéries dégradantes dans le sol affiche une forte hétérogénéité spatiale, non seulement en fonction de la profondeur (Veeh et al., 1996) mais également horizontalement (Vinther et al., 2008), autant à l'échelle centimétrique qu'à l'échelle micrométrique (Chenu and Stotzky, 2002; Young et al., 2008; Raynaud and Nunan, 2014). La répartition spatiale des ressources abiotiques consommées par les bactéries est également hétérogène de l'échelle métrique jusqu'à l'échelle nanométrique (Semple et al., 2003; Young,

2004; Or et al., 2007; Peth et al., 2014; Steffens et al., 2017; Sorenson et al., 2020). Ces hétérogénéités de répartitions spatiales à la fois des dégradeurs et des ressources sont le résultat de l'action de nombreux processus biotiques et abiotiques (Dechesne et al., 2014; Kuzyakov and Blagodatskaya, 2015) et expliquent la variabilité spatiale du potentiel de minéralisation très largement observée dans les sols (Bonkowski et al., 2000; Vieublé Gonod et al., 2003; Badawi et al., 2013). De nombreuses études se sont intéressées à la question de l'hétérogénéité spatiale de la dégradation du carbone organique dans les sols et plus généralement de l'impact des processus spatiaux, c'est-à-dire des répartitions spatiales et de leurs dynamiques, sur la minéralisation. Bien que certaines de ces études mettent en avant un impact négligeable des répartitions spatiales initiales (Rosenbom et al., 2014; Portell et al., 2018), la majorité montre que l'homogénéisation spatiale des bactéries dans le sol favorise la dégradation.

Les études qui se sont employées à comprendre les mécanismes qui gouvernent l'impact des répartitions spatiales sur la dégradation sont peu nombreuses par rapport aux études à visée descriptive, du fait de la complexité expérimentale à contrôler les processus spatiaux dans le sol. Certaines études se sont intéressées assez tôt à cette question, mais appliquée aux racines des plantes. Raynaud and Leadley (2004) ont mis en évidence par modélisation les effets couplés qui peuvent exister entre l'apport diffusif de nutriments, l'occupation de l'espace, la « force » d'absorption (*uptake*) et la compétition entre racines. Bonkowski et al. (2000) ont confronté l'utilisation des nutriments du sol par les microorganismes et par les plantes et ont mis en évidence que la croissance des plantes est favorisée par l'hétérogénéité spatiale des nutriments, plus précisément par l'agrégation des nutriments dans des volumes restreints de sol où ils se trouvent alors fortement concentrés. Les auteurs font l'hypothèse que les plantes sont des meilleures compétitrices que les microorganismes lorsque les nutriments sont agrégés, car les racines peuvent se diriger vers les zones riches d'où elles peuvent absorber efficacement les nutriments concentrés. La concentration en substrats est donc l'élément contrôlant l'efficacité des racines, à l'inverse des microorganismes.

En parallèle, plusieurs travaux se sont intéressés spécifiquement au rôle de la répartition spatiale des bactéries. Parmi ces études à visée explicative spécifiques aux bactéries, certaines ont utilisé le micro-échantillonnage afin de mesurer des densités bactériennes dans le sol à une résolution de 100 μm (Pallud et al., 2004), d'autres ont utilisé des billes d'alginateensemencées de bactéries pouvant ainsi être librement disposées au sein de microcosmes (Dechesne et al., 2010), d'autres ont utilisé des réseaux de fibres de verre mimant le mycélium (hyphes fongiques) et permettant la dispersion facilitée des bactéries (Banitz et al., 2011), quand d'autres encore ont utilisé différentes concentrations de chlorure de sodium pour reproduire différents potentiels osmotiques entravant plus ou moins la motilité des bactéries (Worrich et al., 2016). Ces études mettent en évidence un effet bénéfique de la dispersion des bactéries sur la dégradation, expliqué par une amélioration de l'accès des bactéries à leur substrat due à l'atténuation de la déplétion locale du substrat par des bactéries trop concentrées (Dechesne et al., 2010), et en fin de compte à la réduction

des distances séparant les bactéries de l'ensemble du substrat : « spatial separation between pollutant and degrading organisms as a barrier to mineralization » (Dechesne et al., 2010, p. 2390), « bacterial dispersal ... [helps] to overcome spatial separation » (Worrich et al., 2016, p. 2). Il est essentiel de noter que, dans ces systèmes, le substrat est réparti de manière relativement homogène. Ainsi, la dispersion des bactéries ne diminue pas la concentration en substrat à laquelle elles sont exposées.

Les formulations et les systèmes précédents tendent à suggérer une description binaire des répartitions spatiales, où certains volumes de sol sont considérés comme dépourvus de bactéries (ou de substrat) quand d'autres sont considérés comme pourvus: « microsamples positive [or negative] for the presence of 2,4-D degraders » (Pallud et al., 2004, p. 2710), « there exist volumes of soil of a few cubic centimeters that are devoid of significant degradation potential » (Dechesne et al., 2010, p. 2386), « soil regions comprising several millimeters right up to a few centimeters, which are devoid of 2,4-D degrading activity » (Worrich et al., 2016, p. 2). Ce type de formulation met plutôt l'accent sur certains types de descripteurs tels que les distances euclidiennes ou géodésiques entre les zones pourvues en bactéries et les zones pourvues en substrat (Portell et al., 2018), le temps de premier passage des molécules au voisinage de bactéries immobiles (Babey et al., 2017), la lacunarité de la fraction aqueuse dans le sol etc. Ces notions sont parfois plus simplement regroupées sous le terme d'*accessibilité* (Dungait et al., 2012).

Avec ce cadre de lecture, et comme admis précédemment par l'ANR *Soilμ3D* (fin de section I.2.1), la question du rôle des processus spatiaux se résume ainsi en premier lieu à déterminer la distance entre les bactéries et l'origine de leur substrat, dont l'importance vis-à-vis de la dégradation du carbone a déjà été démontrée et formulée en terme de dilution du substrat (Pinheiro et al., 2015; Babey et al., 2017). Dans cette étude en effet, Babey et al. montrent que lorsqu'un cluster de bactéries est éloigné de quelques centimètres d'un cluster de substrat, la diffusion de ce dernier ne permet pas de compenser l'éloignement initial entre les bactéries et leur substrat, car la masse et la concentration en substrat atteignant les bactéries sont toutes deux très diluées, résultant en une dégradation négligeable. Cette représentation conceptuelle qui s'articule en priorité sur l'accès qualitatif des bactéries à leur substrat a l'avantage d'être particulièrement naturelle à comprendre et à s'approprier. Elle peut néanmoins présenter l'inconvénient de relayer au second plan l'aspect quantitatif des répartitions de concentrations de substrat et de bactéries, c'est-à-dire l'association des valeurs de concentrations à leur position, qui peut jouer un rôle déterminant. Comme cela est relevé par Shi et al. (2021), les valeurs de concentrations apportent une information complémentaire à celle de l'accessibilité qui dans certain cas n'est pas suffisante. En effet, certaines zones du sol peu accessibles ou très restreintes peuvent abriter des concentrations en substrat très élevées quand d'autres zones abritent des concentrations très diluées tout en étant très vastes ou accessibles. Il en va de même pour les densités bactériennes. Dans ces situations, il est intéressant d'adopter une représentation quantitative et de raisonner en termes de valeurs de concentrations et de densités, afin d'éviter toute ambiguïté

d'interprétation. Associer ces valeurs à la description des localisations permet de surmonter certaines simplifications, comme celle de négliger l'effet des valeurs de concentrations sur la métabolisation (Shi et al., 2021), ou réciproquement de négliger l'effet de la métabolisation sur les valeurs de concentrations, c'est-à-dire plus globalement de sous-estimer l'effet complexe de la métabolisation bactérienne et de son interaction avec les processus spatiaux.

La vision quantitative des répartitions spatiales offre tout au moins l'avantage de replacer l'activité bactérienne au premier plan et de souligner les interactions entre métabolisme et spatialité, étant donné que les concentrations en substrat auxquelles les bactéries sont exposées dictent les vitesses de réactions métaboliques (Monod, 1949). Cela signifie que quelques bactéries agrégées dans un petit volume très concentré en substrat seront autant efficaces qu'un grand nombre de bactéries dispersées dans un grand volume de sol peu concentré en substrat. A chaque instant, l'expression selon laquelle « the spatial spreading of bacteria increase[] the probability of encountering the substrate » (Pallud et al., 2004, p. 2715) est vraie si et seulement si les bactéries se dispersent d'une zone peu concentrée en substrat vers une zone plus concentrée. Dans le cas contraire, la dispersion réduit l'exposition des bactéries à leur substrat, ralentit leur métabolisme et défavorise ainsi la dégradation. L'affirmation « bacteria have access to more substrate when larger areas are easy to colonise » (Banitz et al., 2011, p. 2786) est donc à mettre en perspective avec les aspects quantitatifs de la répartition du substrat. Pour cette raison, l'expression « dilution du substrat » sera préférée par rapport à « accessibilité » dans la suite de ce manuscrit, pour désigner expressément la diminution de la concentration en substrat perçue par une bactérie lors de l'accroissement de la distance entre cette bactérie et la localisation initiale du substrat. Au final, ce cadre de lecture soulève la question de l'interaction entre les processus métaboliques des bactéries et les processus spatiaux, plutôt que leur exclusion ou leur superposition.

Lorsque le substrat est considéré comme uniformément réparti dans le sol, la dispersion des bactéries déplace globalement les bactéries vers des zones plus concentrées ou également concentrées. Cette dispersion augmente ainsi l'accès des bactéries au substrat et favorise la dégradation. C'est en effet le cas des quatre études précédentes. Dans les simulations réalisées par Banitz et al. (2011), plusieurs répartitions hétérogènes du substrat sont simulées, mais l'influence de l'hétérogénéité du substrat sur les résultats semble négligeable dans l'étude (Banitz et al., 2011, *fig. 5 a-d* comparées à *e-h*). Cela provient potentiellement du fait que les résultats portent sur des valeurs moyennes tirées de 20 distributions aléatoires, ce qui a pour effet d'effacer les comportements extrêmes. Dans ce contexte, les études conduites par Pinheiro et al. (2015, 2018) sont uniques et particulièrement intéressantes du fait qu'elles étudient l'impact de la répartition hétérogène à la fois des bactéries et du substrat, et qu'elles mesurent quantitativement les valeurs des concentrations en substrat et densités bactériennes. Ces éléments permettent une réelle analyse spatio-temporelle des expositions bactériennes au substrat et de leur réponse

métabolique. C'est par une approche de modélisation et de confrontation des résultats de simulations aux données expérimentales que cette analyse a été effectuée dans cette thèse. Sur des considérations terminologiques, il est à noter que, dans les situations où le substrat est réparti de manière homogène, la rétro-diffusion du substrat peut compenser sa dégradation par les bactéries, ce qui suggère d'employer le terme de « limitation diffusive » pour désigner l'épuisement d'une zone en substrat par les bactéries. Cet emploi perd néanmoins de son sens dès lors que le substrat est spatialement hétérogène, car la rétro-diffusion ne peut alors pas compenser la dégradation. Pour désigner l'effet limitant induit par l'épuisement local du substrat, le terme de « compétition locale pour le substrat » sera ainsi préféré à celui de « limitation diffusive » dans ce manuscrit.

Ces considérations mettent en avant le rôle suspecté des traits d'activité bactériens. Très récemment, le détail du métabolisme des espèces bactériennes a été étudié dans des modèles spatialisés (Pagel et al., 2020). Par ailleurs, l'effet spatial de la saturation de l'activité des bactéries par le substrat a été étudié et quantifié (Chakrawal et al., 2020; Shi et al., 2021). En effet, la concavité (vers le bas) de la fonction de Monod, reliant l'activité spécifique de chaque bactérie à la concentration perçue en substrat, implique que l'activité spécifique des bactéries n'augmente pas linéairement avec l'augmentation de la concentration en substrat. Cet effet est généralement exprimé comme une *saturation* de l'activité bactérienne par le substrat, indiquant que l'activité bactérienne μ tend vers une valeur maximale μ_{max} lorsque la concentration en substrat tend vers l'infini. Par conséquent, la somme des activités de deux bactéries exposées à une concentration moyenne en substrat sera supérieure à l'activité d'une seule bactérie exposée à une concentration double. Shi et al. (2021) ont montré, pour des concentrations en glucose de l'ordre de $2 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ (masse de carbone par masse de sol sec) et en considérant des bactéries réparties uniformément dans un sol, que l'effet de saturation entraînait un impact négatif de l'hétérogénéité spatiale du substrat sur la décomposition, cette dernière étant favorisée lorsque le substrat est réparti de manière homogène.

1.2.3. Rôle de la modélisation sur la question de la spatialité

Les mécanismes fondamentaux sont les mécanismes élémentaires et universels qui permettent d'expliquer la minéralisation dans le sol, quel que soit le système considéré. Ces mécanismes sur lesquels reposent l'ensemble des processus interviennent à des échelles très petites, qui sont souvent difficilement accessibles. Les mécanismes fondamentaux impliqués dans la dégradation microbienne de la matière organique sont généralement étudiés à l'échelle des habitats microbiens, c'est-à-dire à l'échelle micrométrique ou inférieure (Chenu et al., 2017) (voir section 1.2.1). Par conséquent, ces mécanismes fondamentaux sont difficilement mesurables, comme cela est le cas pour les répartitions spatiales et pour les paramètres de transport, et difficilement contrôlables en systèmes réels. En effet, le contrôle de la répartition des bactéries, de leur métabolisme, ou de la diffusion et dispersion, à l'échelle micrométrique, nécessitent d'utiliser des milieux artificiels analogues aux sols. Une

autre possibilité et d'utiliser la modélisation numérique. La modélisation est particulièrement judicieuse pour étudier des processus relativement bien caractérisés mais trop difficiles à contraindre physiquement, tels que la diffusion à l'échelle du μm . Par ailleurs, la modélisation offre la capacité de pouvoir relier différentes échelles spatiales, par le biais de l'expérimentation numérique où il est possible de combiner des mécanismes fondamentaux et d'analyser les propriétés émergentes qui en émanent et qu'il est alors possible de comparer à des observations physiques plus agrégées donc plus facilement mesurables. La comparaison avec des données d'observation permet de vérifier les postulats émis sur les mécanismes fondamentaux, le premier étant d'évaluer si le choix nécessairement limité des mécanismes pris en compte permet d'expliquer une part satisfaisante du phénomène étudié ou pas.

1.2.3.1. Échelle spatiale du modèle

Par ailleurs, les données d'observation permettent également de définir le système d'étude et de donner un cadre au modèle, notamment spatial. Dans ce travail, la discrétisation spatiale des modèles sera généralement basée sur les données expérimentales de référence. Cette discrétisation ainsi que les densités bactériennes qui lui sont associées (voir aussi **Tableau 4**, section III.2.2) permettent d'être dans des conditions adéquates pour utiliser un modèle biologique populationnel. Ce type de modèle offre l'avantage de pouvoir modéliser les processus bactériens de manière déterministe sans recourir à des processus stochastiques, comme c'est le cas pour les modèles individus-centrés. Une attention particulière sera portée à la simplification des modèles utilisés et à la sélection de modèles parcimonieux au regard des problématiques. Dans cette optique, la communauté bactérienne du sol sera prise dans son ensemble et considérée comme une population homogène (ce point sera discuté en section III.1.4.2). Les paramètres, à l'image des concentrations, seront des représentations effectives des processus aux échelles de travail (mm, cm), qui intégreront conceptuellement les processus en jeu aux échelles plus fines.

1.2.3.2. Modèles de cinétiques bactériennes

A l'heure actuelle, la modélisation est un outil communément utilisé pour étudier et prédire ce que l'on appelle les « cinétiques microbiennes », c'est-à-dire les vitesses et les mécanismes des processus microbiens tels que la croissance, la mortalité, la maintenance, la consommation de ressources, et bien d'autres (Panikov, 2009). La démarche de modélisation des cinétiques microbiennes est relativement ancienne, comme en témoigne par exemple le modèle de Blackman (1905) qui donnait déjà il y a plus d'un siècle une relation entre l'activité métabolique et un facteur limitant, sous la forme d'une relation linéaire à deux branches (**Figure I.4**).

Modèle de Blackman

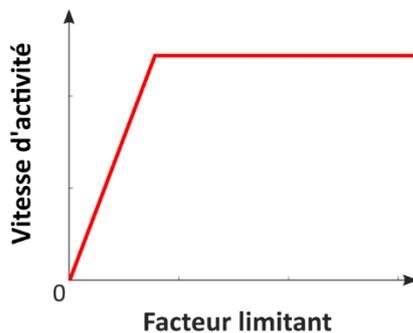


Figure I.4. Relation de Blackman entre l'activité d'une population et la présence du facteur limitant.

Dans cette thèse, nous nous intéresserons principalement à la dégradation d'un substrat bactérien (voir section I.2.4), et par conséquent aux cinétiques d'absorption¹ du substrat et de croissance bactérienne. Il existe une diversité considérable de modèles de dégradation microbienne de molécules organiques. Une partie est illustrée dans l'étude de Schmidt et al. (1985), indépendamment des cinétiques de croissance. Néanmoins cette thèse se focalisera en premier lieu sur le modèle de Monod (1949), qui donne une relation concave vers le bas entre la vitesse spécifique² de croissance μ d'une population microbienne et la concentration S en substrat limitant (**Figure I.5**), selon l'équation :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{S + \kappa_M} \quad \text{Éq 1}$$

où μ_{max} est la vitesse spécifique maximale de croissance (*maximum specific growth rate*) et κ_M la « constante de (demi)saturation », appelée également « constante d'affinité », et qui décrit la concentration en substrat pour laquelle la vitesse de croissance bactérienne vaut la moitié de la vitesse de croissance maximale. Le modèle de Monod est un modèle qui a été et reste abondamment utilisé dans tous les secteurs de la microbiologie, si ce n'est le plus utilisé. Ce modèle a été établi et présenté par Monod comme un modèle phénoménologique (Koch, 1998), c'est-à-dire sans explication des mécanismes fondamentaux, ce qui demeure le cas, bien que de nombreux travaux se soient depuis attachés à déterminer les mécanismes

¹ Le terme d'absorption (*uptake*) sera utilisé pour désigner la capture d'un substrat dissout par les cellules bactériennes, sans détailler plus précisément les mécanismes d'absorption en jeu. En pratique dans ce travail, le terme « d'absorption » revêt un sens similaire à celui de « consommation », à la différence qu'une fraction (minime) du substrat absorbé peut potentiellement ne pas être oxydée et être libérée à la mort de la cellule.

² Le terme « spécifique » indique que la vitesse de croissance se rapporte à une unité de bactéries (massique, numéraire ou autre). Ce terme sera souvent omis dans ce document.

sous-jacents (Desmond-Le Quéméner and Bouchez, 2014; Liu, 2007). A noter que le modèle de Monod est un modèle populationnel, c'est-à-dire valide pour décrire la cinétique d'une culture microbienne et non pas d'individus isolés, et que le modèle postule que chaque bactérie est exposée à la totalité de la concentration en substrat à son voisinage, indépendamment de la densité bactérienne (Lobry and Harmand, 2006). La vitesse de croissance μ peut être reliée à la vitesse d'absorption en la divisant par le rendement de croissance y , défini comme la dérivée de l'accroissement de la biomasse microbienne par rapport à la consommation de substrat (Panikov, 2009).

Il est nécessaire d'apporter quelques précisions sur le ratio μ_{max}/κ_M , ou plus précisément $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$, qui occupera une place importante dans les résultats de cette thèse. Par symétrie avec μ_{max}/y qui décrit la vitesse d'absorption du substrat lorsque la concentration de ce dernier tend vers l'infini, l'expression $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M \times S$ décrit la vitesse d'absorption du substrat lorsque sa concentration tend vers zéro (**Figure I.5**, lignes en pointillés longs). La pente en zéro exprimée par le terme $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ traduit la capacité maximale de la cellule à absorber les molécules de substrat qui entrent en contact avec sa membrane (Button, 1983, 1978). Il en découle que ce terme admet une limite physique déterminée par la fréquence de contact entre les molécules de substrat et la membrane de la bactérie. Cette limite est appelée « limite collisionnelle » (Abbott and Nelsestuen, 1988; Koch, 1971) et est largement supérieure à toutes les valeurs de $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ testées dans cette thèse (**Figure I.5**, lignes en pointillés courts). Pour plus de détails, se référer à la section III.1.3–S.5. De nombreuses études ont conclu que le rapport $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ était un descripteur pertinent de l'affinité des bactéries pour un substrat, c'est-à-dire leur capacité maximale à capturer les molécules de substrat qui entrent en contact avec leur membrane (Button, 1991; Koch and Houston Wang, 1982; Law and Button, 1977; Lobry, 1991; Sommer, 1986), et ont proposé le terme « d'affinité spécifique ». Néanmoins, pour éviter toute confusion avec le terme κ_M parfois dénommé « affinité », le rapport sera désigné sous l'appellation « efficacité spécifique maximale d'absorption », reprenant le terme « d'efficacité » de Koch and Houston Wang (1982).

Les résultats présentés en section III amèneront à considérer un deuxième modèle, le modèle de Contois (1959), détaillé à ce moment-là.

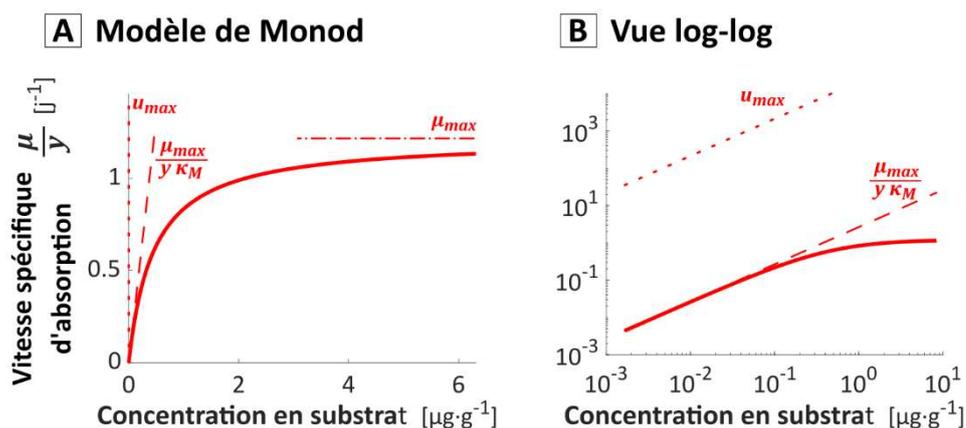


Figure I.5. Modèle de Monod - Relation entre la concentration en substrat et la vitesse d'absorption, avec les paramètres calibrés issus de (Babey et al., 2017). La relation est représentée en traits continus. Dans ce modèle, la vitesse d'absorption tend vers une valeur limite (μ_{max}) quand la concentration en substrat augmente (traits pointillés alternés). À l'inverse, lorsque la concentration en substrat approche zéro, l'absorption bactérienne devient proportionnelle à la concentration en substrat d'un facteur $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ (traits pointillés longs), appelé dans ce travail « efficacité maximale d'absorption ». Ce facteur admet une limite physique théorique u_{max} appelé « limite collisionnelle » (traits pointillés courts). Celle limite est ici plus de 8000× supérieure à l'efficacité maximale d'absorption. Le graphique (A) est représenté en échelle logarithmique sur le graphique (B) afin de faciliter la visualisation de la limite collisionnelle.

I.2.4. Choix du système d'étude

Comme cela a été vu précédemment, les mécanismes à l'œuvre à l'échelle micrométrique demeurent encore en grande partie inaccessibles. La caractérisation et la compréhension progressives de ces mécanismes s'accompagnent d'une question qui est celle de savoir si les descripteurs microscopiques pourront servir à prédire le comportement des systèmes à l'échelle macroscopique, qui est en fin de compte l'échelle d'intérêt principale (Addiscott, 2010). Nous avons fait le choix de se situer à une échelle intermédiaire, l'**échelle millimétrique**, avec pour ambition à la fois d'étudier des mécanismes fondamentaux à l'échelle des bactéries et de formaliser leurs impacts à l'échelle macroscopique. L'échelle millimétrique, plus agrégée que l'échelle micrométrique, est particulièrement adaptée pour étudier les mécanismes fondamentaux au travers de leurs interactions, ce qui facilite également la transposition des phénomènes résultants, qualifiés d'émergents, à une échelle supérieure. Plus précisément, les systèmes étudiés couvriront une échelle de quelques cm et auront une résolution spatiale¹ de quelques mm.

Le carbone organique du sol regroupe un ensemble extrêmement vaste et diversifié de composés, plus ou moins solubles, plus ou moins interagissant avec les surfaces, plus ou

¹ La résolution spatiale décrit la taille du plus petit élément mesuré ou modélisé, c'est-à-dire dans notre cas la taille de la discrétisation spatiale de notre système. Elle représente la granularité du modèle.

moins dégradables, plus ou moins mobiles, plus ou moins hétérogènement répartis, etc. Le champ d'étude de ce travail se limitera aux molécules organiques dissoutes et facilement dégradables, plus précisément celles pouvant être utilisées par différentes espèces bactériennes comme source unique de carbone et d'énergie. Ce type de soluté, qualifié de substrat bactérien, permettra certaines analogies avec les connaissances de microbiologie en bioréacteur. Plus précisément, l'acide 2,4-dichlorophénoxyacétique (2,4-D) a été choisie comme molécule modèle générique dans ce travail (**Figure I.6**). Le 2,4-D (parfois nommé 2,4-D ester) est un pesticide organique synthétique de la famille des herbicides phénoxy, et l'un des herbicides les plus utilisés dans le monde au cours des 75 dernières années et encore aujourd'hui (Islam et al., 2018). Cette large utilisation en fait également un pesticide fréquemment détecté dans notre environnement (eau, air, nourriture), ce qui lui confère une place importante au sein de la problématique de pollution des sols et qui lui vaut d'avoir été abondamment étudié dans la littérature scientifique, autant sur ses aspects de (éco)toxicologie que sur ses propriétés physiques, biologiques et chimiques. Ainsi, au-delà de son statut de pesticide, le 2,4-D est une molécule bien caractérisée et qui possède des propriétés qui en font un exemple particulièrement pertinent pour étudier plus généralement le devenir du carbone organique dissout (*Dissolved Organic Carbon*) dans les sols (Boivin et al., 2005). Le 2,4-D est en effet une molécule facilement mobile et dégradable. Le 2,4-D a une solubilité dans l'eau de $23 \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ à pH 7 et 22°C (Boivin et al., 2005) et un coefficient de diffusion dans l'eau de $6.9 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2\cdot\text{j}^{-1}$ à 25°C (Saxena et al., 1974). Les cinétiques d'adsorption du 2,4-D sur les particules du sol sont généralement très variables d'un sol à l'autre (Matthies et al., 2008; Shareef and Shaw, 2008).

La dégradation du 2,4-D est principalement biologique. Les microorganismes capables de dégrader le 2,4-D sont naturellement présents dans les sols cultivés (Vieublé Gonod et al., 2003). Une partie de ces microorganismes dégrade le 2,4-D par cométabolisme et est généralement très sensible aux effets toxiques du 2,4-D (Fournier, 1980), tandis que certaines populations spécifiques du sol sont capables de l'utiliser comme « substrat » source de carbone et d'énergie (Don and Pemberton, 1981; Pieper et al., 1988), jouant alors un rôle majeur dans sa dégradation. Les bactéries capables d'utiliser le 2,4-D comme substrat peuvent être classées dans trois groupes aux caractéristiques physiologiques et évolutives distinctes (Kamagata et al., 1997). Le premier groupe, qui est à la fois le groupe majoritaire et le mieux caractérisé actuellement, regroupe des bactéries porteuses des gènes *tfd* (Ka et al., 1994). Les gènes *tfd* sont un ensemble de gènes codant pour une voie métabolique de dégradation du 2,4-D (Don and Pemberton, 1981; Pieper et al., 1988; Tiedje et al., 1969) et sont portés par un plasmide, par ailleurs transférable entre bactéries de différentes espèces (McGowan et al., 1998). Le premier gène de cette voie métabolique, nommé *tfdA*, est fréquemment utilisé pour détecter les dégradeurs du 2,4-D dans les sols (Bælum et al., 2006). La dégradation du 2,4-D médiée par les endoenzymes *tfd* se déroule à l'intérieur des cellules bactériennes, le 2,4-D étant une molécule suffisamment légère (221 Da) pour être absorbée par les bactéries (Don and Weightman, 1985). Dans ce travail, le rôle des mycètes n'a pas été

considéré du fait qu'ils n'aient pas été observés dans les expériences réalisées avec du sol reconditionné. Il a également été fait le choix de ne pas considérer le rôle spécifique des archées, qui ont ainsi été modélisées de manière agrégées avec les bactéries. Néanmoins, de plus en plus de travaux récents s'intéressent à leur rôle. Par simplicité, la suite de ce travail se référera simplement aux bactéries.

La faculté du 2,4-D à être facilement biodégradable et transporté en font une molécule modèle judicieuse pour étudier la minéralisation des substrats bactériens dissouts, en particulier ceux soumis à l'effet des processus de transport.

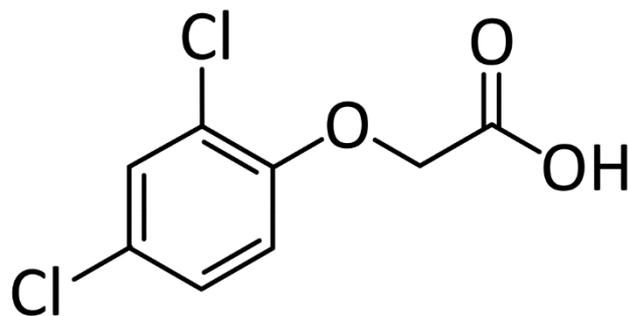


Figure I.6. Formule topologique de la molécule de 2,4-dichlorophénoxyacétique.

Enfin, dans cette thèse, nous nous intéresserons exclusivement à la couche arable du sol (horizon A sur la **Figure I.1**) dépourvue de végétation et donc de systèmes racinaires et qualifiée alors de sol nu (*bulk soil*). A la différence de la rhizosphère, le sol nu est plus pauvre en composés organiques et en microorganismes (Kuzyakov and Blagodatskaya, 2015).

Points clés

- ▶ La description quantitative des répartitions spatiales, incluant les valeurs de concentrations, semble être nécessaire pour étudier des systèmes où les bactéries et leurs ressources sont toutes deux spatialement hétérogènes.
- ▶ Dans le même temps, la description quantitative des répartitions spatiales fait ressortir les interactions entre l'activité microbienne et les processus spatiaux.
- ▶ L'expérimentation numérique par le biais de la modélisation est particulièrement bien adaptée pour étudier les effets interactifs entre l'activité bactérienne et la dispersion/diffusion.
- ▶ Le système d'étude se limitera au sol nu, en utilisant le 2,4-D comme substrat bactérien modèle et en considérant sa dégradation par les bactéries porteuses du gène *tfdA*.

I.3. Problématiques de la thèse

De l'état des lieux dressé dans la section I.2.1, il apparaît que les mécanismes fondamentaux à l'échelle micrométrique représentent un axe important de la recherche actuelle sur la dégradation du carbone organique des sols (Manzoni and Porporato, 2009). Parmi eux, le rôle des répartitions spatiales occupe une place centrale (Chenu et al., 2017; Lehmann and Kleber, 2015) (section I.2.2). Cependant, la compréhension des mécanismes fondamentaux qui régissent l'activité des microorganismes du sol se heurte encore aujourd'hui à la difficulté d'observation des processus à l'échelle de l'habitat microbien (Baveye et al., 2018). Face à ce constat, la modélisation numérique joue un rôle unique de par sa capacité à faire le lien entre les hypothèses théoriques élaborées à l'échelle micrométrique et les observations obtenues aux échelles plus larges (section I.2.3). Cette démarche d'expérimentation numérique s'avère extrêmement utile pour comprendre a posteriori le rôle joué par différents mécanismes fondamentaux, au préalable connus et étudiés dans des environnements contrôlés, dans la manifestation de phénomènes agrégés tels que la dégradation du carbone organique du sol. Les processus de transport hydrodynamiques ou les processus de croissance et de dégradation microbienne (en particulier bactérienne) font partie de ces mécanismes fondamentaux bien caractérisés en milieu contrôlé. On connaît ainsi avec certitude leur existence dans les sols sans pour autant être capable de juger leur portée ou leurs possibles intrications, et donc en définitive leur implication précise dans le devenir du carbone organique.

C'est cette démarche d'expérimentation numérique qui a été mise en œuvre dans cette thèse, pour répondre à plusieurs questions autour du rôle des répartitions spatiales et des processus qui les façonnent dans la dégradation du carbone organique du sol. L'objectif principal est de **mieux caractériser, comprendre et prédire la dégradation dans les sols**. Suite à la mise en évidence de l'importance de la dilution du substrat comme contrôle de la dégradation par Babey et al. (2017) et Pinheiro et al. (2015), la question est [1] **de savoir si le rôle des répartitions spatiales et des processus de transport qui les remodelent peut se réduire à la distance entre les bactéries et l'origine de leur substrat**, comme cela a été soulevé précédemment (section I.2.2). Cette question a en premier lieu nécessité de définir le rôle de cette distance et de comprendre ses relations avec les autres contrôles de la dégradation, faisant au final ressortir l'importance des traits métaboliques. La démarche engagée a abouti à une deuxième question, devenue progressivement centrale dans la thèse : [2] **le rôle des répartitions spatiales et des processus de transport peut-il être appréhendé indépendamment des traits métaboliques ?** Ou au contraire, est-il nécessaire d'intégrer l'activité métabolique et les processus de transport pour prédire la dégradation ? L'étude des interactions entre l'impact des répartitions spatiales, des processus de transport et des traits métaboliques a constitué le cœur de la thèse.

La modélisation fournit un outil déterminant pour étudier théoriquement les interactions entre processus et les propriétés émergentes qui peuvent en résulter. Ceci a eu pour effet

de placer la modélisation (notamment du métabolisme bactérien mais également des processus de transport) au cœur de l'étude, ce qui a amené à une troisième question : [3] **quels sont les modèles de dégradation du carbone les mieux adaptés** pour prendre correctement en compte les mécanismes fondamentaux principaux, en particulier lorsque les répartitions spatiales jouent un rôle important ? Le modèle de Monod est-il adapté pour modéliser l'activité bactérienne dans les sols dans ces conditions ? Idéalement, au-delà d'un modèle, est-il possible de trouver un descripteur qui permette facilement de prédire la dégradation ? La compréhension des mécanismes a ainsi permis de formaliser correctement leur modélisation mais également de contourner la difficulté d'observation de l'échelle bactérienne en induisant des hypothèses sur les répartitions micrométriques et les stratégies bactériennes de mobilité.

L'ensemble de ces questions a été abordé en se basant sur des expériences réalisées en laboratoire sur des colonnes de sol (Pinheiro et al., 2015, 2018) (voir section II.1) et sur lesquelles s'est appuyé le développement progressif de modèles, commencé déjà avant cette thèse (Babey et al., 2017). Ces données ont été indispensables pour **confronter les conclusions théoriques des modèles aux processus impliqués dans les sols**. Ce cadre expérimental inclut tout particulièrement des modalités ayant été peu étudiées jusqu'à présent, à savoir la répartition hétérogène du substrat soumis à des processus d'advection¹-dispersion, amenant ainsi à la question sous-jacente suivante : que changent la répartition hétérogène du substrat en plus de celle des bactéries, et leur remodelage dynamique par les processus d'advection-dispersion ? Au-delà de ce cadre expérimental, les conclusions et les réponses aux questions précédentes ont été envisagées dans d'autres situations, d'autres échelles spatiales et temporelles (sections IV.1, 0), et d'autres problématiques comme par exemple celle de l'impact de l'intermittence des précipitations (section V.2.1).

¹ Transport de particules mobiles entraîné par le mouvement d'écoulement en masse de l'eau au sein du sol. Dans ce document, le transport par advection décrit le déplacement du centre de masse d'un panache de particules, par démarcation avec le transport par dispersion qui décrit l'étalement d'un panache sans changement de son centre de masse.

Résumé du chapitre I.

Le carbone organique du sol est le vecteur des services écosystémiques qui assurent les besoins les plus essentiels de notre espèce. Au vu de l'importance vitale de ses fonctions, le cycle du carbone organique du sol mérite d'être mieux compris. Cependant, les processus fondamentaux qui gouvernent le cycle du carbone agissent à des échelles micrométriques ou inférieures, ce qui les rend encore peu accessibles. La modélisation offre un outil précieux pour comprendre comment les interactions potentielles entre ces processus pourraient se traduire à une échelle plus proche de l'échelle humaine. Le rôle des processus spatiaux fondamentaux sera abordé initialement par une approche plutôt physique avant de basculer vers une étude des interactions physico-biologiques entre les processus liés aux répartitions spatiales et les processus liés à l'activité bactérienne.

Savoir s'étonner à propos est le premier pas fait sur la route de la découverte.

— Louis Pasteur

II Travaux préliminaires

Ce chapitre présente les analyses et les résultats qui ont précédé la publication principale issue de cette thèse. Il présente le cheminement des idées qui ont conduit à délimiter la problématique, et introduit les trois chapitres suivants.

II.1. Présentation des expériences et du modèle initial

Comme présenté dans la section précédente, l'étude du rôle des répartitions spatiales s'est basée sur une approche de modélisation adossée aux deux séries d'expériences réalisées par Pinheiro et al. (2015, 2018) et au modèle précédemment développé par Babey et al. (2017). La reproduction par modélisation des observations expérimentales a été définie comme la première étape de cette thèse. Etant donné l'importance de ces expériences et de ce modèle préexistant pour la suite de ce manuscrit, les aspects les plus importants sont résumés ici.

Comme détaillé sur la **Figure II.1**, Pinheiro et al. (2015, 2018) ont réalisé deux séries d'expériences dans des colonnes de sol de taille centimétrique constituées d'un assemblage de cubes de sol de 6 mm × 6 mm × 10 mm. Cet assemblage a permis de recréer des répartitions initiales spécifiques de 2,4-D et de dégradeurs bactériens (**Figure II.1A** et **B**). Chaque cube de sol était reconstitué avec des agrégats de 2 à 3.15 mm issus de l'horizon labouré d'un sol cultivé sans 2,4-D depuis plus de 15 ans. Les agrégats pouvaient être soit intacts, soit irradiés, et être amendés en ¹⁴C-2,4-D ou non. Les cubes étaient construits de manière à présenter les mêmes propriétés physiques et à être considérés comme des entités élémentaires homogènes. Différentes répartitions spatiales initiales ont été testées, désignées sous les termes de conditions « homogène », « colocalisée » et « disjointe ». Le potentiel hydrique était maintenu à -31.6 kPa.

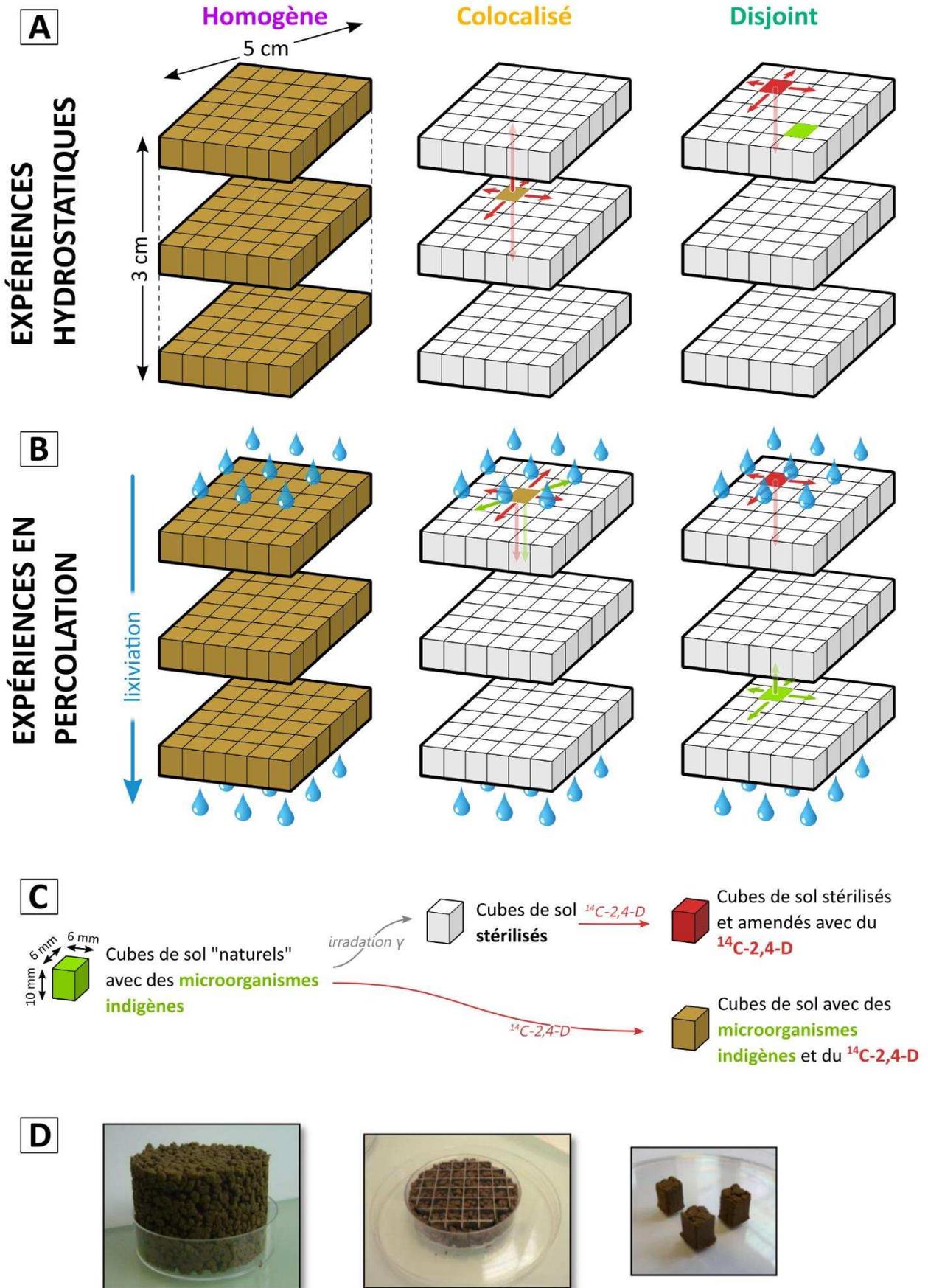


Figure II.1. Principaux traitements expérimentaux mis en place. La première série d'expériences (A) sera désignée par le terme « hydrostatique » et se réfère aux expériences décrites dans

(Pinheiro et al., 2015). La deuxième série d'expériences (**B**) sera désignée par le terme « percolation » et se réfère aux expériences décrites dans (Pinheiro et al., 2018). Lors des évènements d'irrigation, l'eau est apportée en haut de colonne pendant 1h et s'écoule vers les bas. Les bords de la colonne de sol sont étanches, signifiant qu'il n'y a pas de fuite de ^{14}C à l'exception du bas de la colonne et du $^{14}\text{CO}_2$ dégazé. L'obtention des cubes est décrite sur le schéma (**C**). Les photos de la colonne de sol et des cubes (**D**) sont issues de (Pinheiro et al., 2015).

La première série d'expériences a été conduite sans épisode d'irrigation et sera désignée par le terme « hydrostatique ». La deuxième série d'expériences a été conduite avec trois épisodes d'irrigation au cours desquels 10.6 ml d'eau était arrosés pendant 1h, représentant 35% de la porosité totale à chaque arrosage (**Figure II.2**). La production de $^{14}\text{CO}_2$ été suivie pendant la durée des expériences, variant de 14 à 24 j (**Figure II.3**). Des mesures de ^{14}C -2,4-D ont été réalisées en fin d'expérience, ainsi que des mesures de gènes *tfdA* par qPCR, permettant de quantifier la population de dégradeurs microbiens du 2,4-D. La densité initiale de *tfdA* était semblable entre les deux séries d'expériences, respectivement $4.65 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$ et $2.90 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$ (nombre de copies de *tfdA* par masse de sol sec) en hydrostatique et en percolation, tandis que la concentration initiale en 2,4-D était 8× plus importante, respectivement $1.9 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ et $15 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ (masse de 2,4-D par masse de sol sec) en hydrostatique et en percolation (**Tableau 1**).

Les épisodes de percolation ont induit trois phénomènes observables. D'une part, environ 50% de la quantité initiale de ^{14}C a été lixiviée au cours des trois irrigations, peu importe la configuration spatiale. D'autre part, la percolation a entraîné la dispersion des bactéries, visible à l'échelle millimétrique (voir section II.2 suivante). Enfin, la percolation a conduit à une augmentation notable et inattendue de la minéralisation dans les expériences colocalisée et disjointe (**Figure II.3**). En particulier, la minéralisation finale dans l'expérience colocalisée était de 13% du substrat initial en conditions hydrostatiques, contre 54% du substrat initial non-lixivé en conditions de percolation. Cette différence très marquée est d'autant plus surprenante qu'il avait été déduit, à partir de la minéralisation nulle de l'expérience disjointe hydrostatique (**Figure II.3**), que l'activité des bactéries était fortement limitée par la dilution du substrat (Babey et al., 2017). Il suffit d'une séparation de 2.5 cm entre l'origine du substrat et les bactéries pour que le substrat qui diffuse jusqu'aux bactéries soit trop dilué. Or la percolation de l'eau est censée justement favoriser les phénomènes de dispersion à l'intérieur du sol et donc diluer les zones de hautes concentrations en substrat et disperser les bactéries dans la colonne de sol. Le rôle de la concentration en substrat à laquelle les bactéries sont exposées apparaît donc particulièrement ambigu.

Teneur en eau

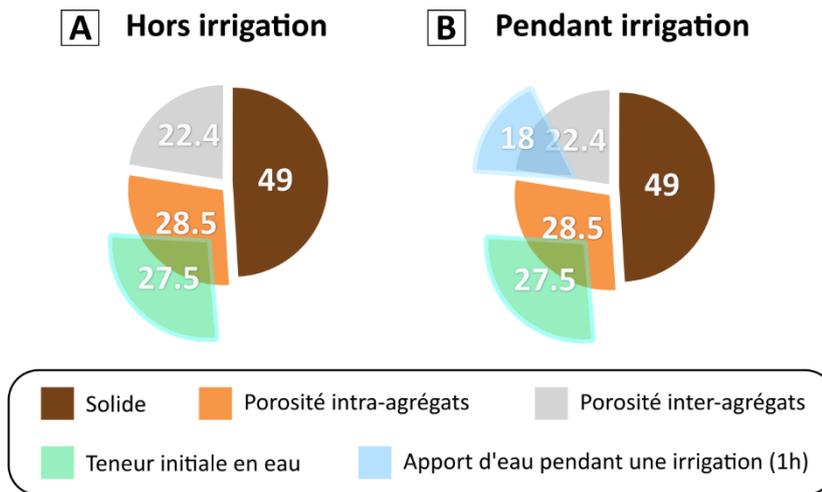


Figure II.2. Bilan de l'évolution de la teneur en eau. Pour les expériences hydrostatiques et les expériences en percolation en dehors des épisodes d'irrigation, la teneur en eau est maintenue constante (A). Pour les expériences en percolation pendant les épisodes d'irrigation, la teneur en eau fluctue temporairement (B). Les trois épisodes d'irrigation apportent approximativement l'équivalent d'un volume poral en eau. Les valeurs en blanc sont indiquées en pourcentage.

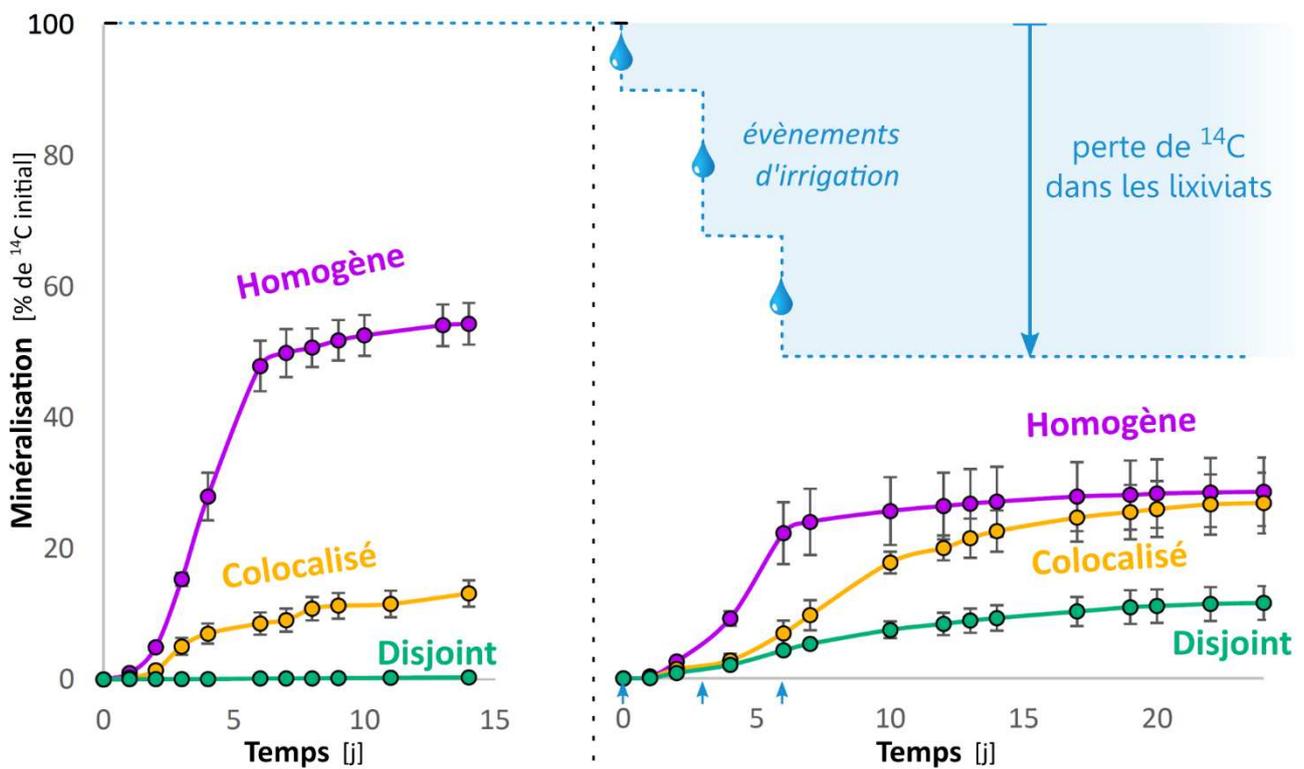


Figure II.3. Production cumulée de CO₂ mesurée dans les expériences de Pinheiro et al., (2018, 2015). Les noms des expériences se rapportent à la Figure II.1.

Tableau 1. Conditions expérimentales pour chaque expérience. La diffusion ne s'applique qu'au substrat (^{14}C -2,4-D), tandis que la dispersion hydrodynamique s'applique à la fois au substrat et aux dégradeurs bactériens (voir section II.2). La diffusion et la dispersion remodelent les répartitions des espèces mobiles à l'échelle de la colonne de sol seulement dans les expériences colocalisée et disjointe, ce qui est indiqué par les cellules grisées.

		Coefficient de diffusion effectif d_{diff} [$\text{m}^2\cdot\text{j}^{-1}$]	Densité initiale en dégradeurs $B(t=0)$ [g^{-1}] (nombre de copies de gènes <i>tfdA</i> par masse de sol sec)	Concentration initiale en ^{14}C -2,4-D $S(t=0)$ [$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] (masse de 2,4-D par masse de sol sec)	Episodes de percolation
Expériences hydrostatiques	Homogène	10^{-5} ^a	$4.65 \cdot 10^5 \text{ }^b$	$1.9 \cdot 10^{-6} \text{ }^c$	Pas de percolation
	Colocalisé ou Disjoint	10^{-5} ^a	$4.65 \cdot 10^5 \text{ }^b$	$1.9 \cdot 10^{-6} \text{ }^c$	Pas de percolation
Expériences en percolation	Homogène	10^{-5} ^a	$2.90 \cdot 10^5 \text{ }^b$	$15 \cdot 10^{-6} \text{ }^c$	Lixiviation et dispersion hydrodynamique
	Colocalisé ou Disjoint	10^{-5} ^a	$2.90 \cdot 10^5 \text{ }^b$	$15 \cdot 10^{-6} \text{ }^c$	Lixiviation et dispersion hydrodynamique

^a Les valeurs de d_{diff} sont celles du coefficient de diffusion effectif du 2,4-D calibré par Babey et al. (2017) sur une grille de $3 \times 6 \times 6$ cubes dans des conditions similaires.

^b Les valeurs de $B(t=0)$ pour les expériences hydrostatique et en percolation correspondent respectivement à $2.27 \cdot 10^9$ et $1.42 \cdot 10^9 \text{ l}^{-1}$ (nombre de dégradeurs par volume d'eau).

^c Les valeurs de $S(t=0)$ pour les expériences hydrostatique et en percolation correspondent respectivement à des concentrations en soluté de 41.9 et 331 $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$ (quantité de 2,4 D par volume d'eau)

Sur la base de la série d'expériences hydrostatiques, un modèle de transport bioréactif avait été développé précédemment (Babey et al., 2017). Ce modèle prend en compte les différentes fractions de carbone organique mesurées par Pinheiro et al., (2015) et les associe aux différents compartiments décrits sur la **Figure II.4**. Le substrat dissout S (^{14}C -2,4-D) peut être absorbé par les bactéries B suivant une cinétique de Monod (I.2.3.2 (Lobry, 1991; Monod, 1949)). Le modèle de Monod exprime la vitesse spécifique maximale de croissance des bactéries μ par une relation concave avec la concentration en substrat S :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{\kappa_M + S} \quad \text{Éq 2}$$

avec μ_{max} la vitesse spécifique maximale de croissance et κ_M la constante de saturation. La vitesse d'absorption est reliée à la vitesse de croissance par le rendement de croissance y , équivalent à l'expression $-dB/dS$ et considéré constant dans ce modèle. Le substrat absorbé peut soit être incorporé à la biomasse bactérienne soit métabolisé en CO_2 (Éq 3). La dynamique de population des bactéries dB/dt dépend de la somme de la vitesse spécifique

de croissance μ et de la vitesse spécifique de mortalité m_t (Éq 4). Afin de reproduire les dynamiques tardives de minéralisation, il est apparu nécessaire de prendre en compte un processus de recyclage des nutriments (*nutrient recycling*), en considérant qu'une fraction χ de la nécromasse est réincorporée au stock de substrat en solution (Éq 9), tandis que la fraction restante évolue en résidus biotiques (R_B , Éq 5). Enfin, de manière à reproduire la phase de latence, il est apparu nécessaire d'introduire un retard dû au temps d'accommodation des bactéries à leur nouvel environnement et modélisé par la vitesse d'accommodation α (Patarinska et al., 2000). La vitesse spécifique de croissance μ dépend ainsi du temps en plus de dépendre de la concentration en substrat S . L'expression de μ décrite à l'Éq 2 est alors remplacée par l'Éq 6. En plus des processus de biodégradation, une fraction du substrat peut s'adsorber sur les particules minérales du sol, de manière réversible (A , Éq 7) ou irréversible (R_S , Éq 8).

$$\frac{dCO_2}{dt} = \frac{(1-y)}{y} \mu B \quad \text{Éq 3}$$

$$\frac{dB}{dt} = (\mu - m_t) B \quad \text{Éq 4}$$

$$\frac{dR_B}{dt} = m_t(1 - \chi) B \quad \text{Éq 5}$$

$$\frac{d\mu}{dt} = \alpha \left(\mu_{max} \frac{S}{\kappa_M + S} - \mu \right) \quad \text{Éq 6}$$

$$\frac{dA}{dt} = k_{SA}S - k_{AS}A \quad \text{Éq 7}$$

$$\frac{dR_S}{dt} = k_R S \quad \text{Éq 8}$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{y} B + m_t \chi B - k_{SA}S + k_{AS}A - k_R S \quad \text{Éq 9}$$

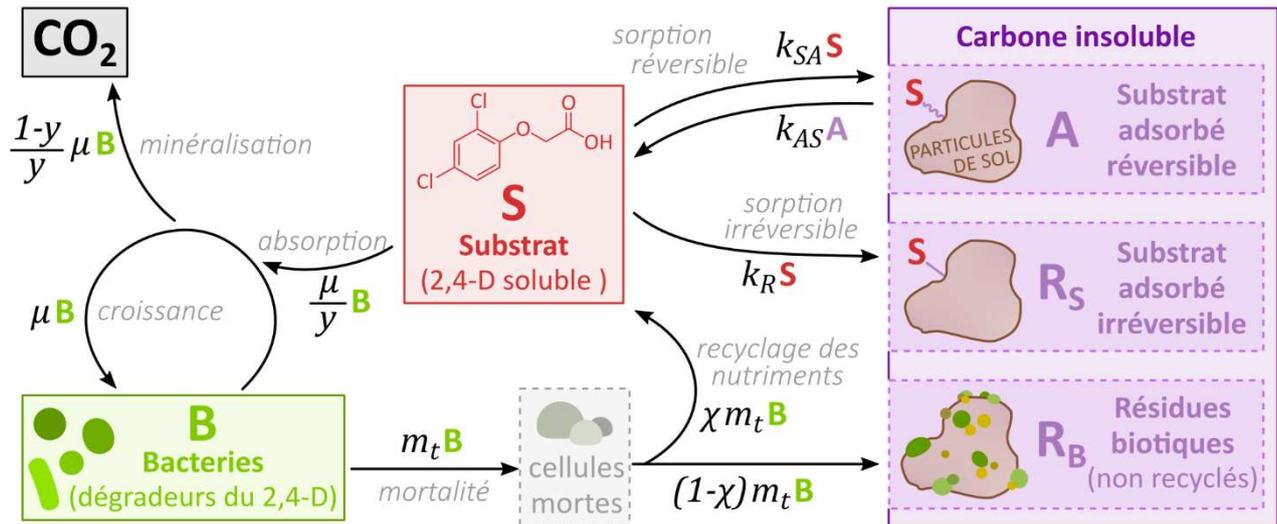


Figure II.4. Schéma du modèle bioréactif développé par (Babey et al., 2017). Les compartiments sont représentés dans les rectangles et les flux sont représentés par les flèches. Le délai d'accommodation induit par α n'est pas représenté. En condition de faible concentration S en substrat, la vitesse spécifique d'absorption μ/y tend vers $(1/y)\cdot\mu_{max}/K_M\cdot S$, où $(1/y)\cdot\mu_{max}/K_M$ est désigné sous le terme d'efficacité maximale d'absorption.

Par soucis d'homogénéité, les concentrations de substrat et les densités de bactéries seront généralement exprimées en masse de carbone par masse de sol sec ($\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$). Pour favoriser la comparaison avec la littérature concernée, l'efficacité maximale d'absorption des bactéries sera également fréquemment exprimée en masse de bactéries par volume d'eau ($\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$).

Les réactions décrites précédemment ont ensuite été spatialisées de manière à pouvoir coupler spatialement les concentrations de substrat par un processus de diffusion, d'après les équations :

$$r(S) = -\frac{\mu}{y} B + m_t \chi B - k_{SA}S + k_{AS}A - k_R S \quad \text{Éq 10}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = r(S) + \nabla(d_{diff} \nabla S) \quad \text{Éq 11}$$

avec $r(S)$ la vitesse de réaction du substrat. Ce modèle de transport bioréactif a été calibré sur l'ensemble des expériences hydrostatiques. Les valeurs des paramètres calibrées sont présentées dans le **Tableau 2**. Néanmoins, appliquée telle quelle aux expériences en percolation, cette calibration ne permet pas de retrouver les observations. Si l'on simule l'expérience colocalisée avec percolation sans modéliser de mécanisme supplémentaire dû à la percolation, à l'exception de la lixiviation homogène du carbone mobile pour tenir compte des valeurs mesurées de lixiviats, on obtient une cinétique de minéralisation semblable à celle de l'expérience colocalisée sans percolation (**Figure II.5**). Cette cinétique est très différente de celle observée avec percolation. Cette observation suggère un rôle

prépondérant de mécanismes dispersifs, contradictoire avec le fait que la dispersion des bactéries loin de l'origine du substrat aura inéluctablement pour effet de les exposer à des concentrations plus diluées, comme cela est le cas dans l'expérience disjointe hydrostatique. La réconciliation de ces différentes compréhensions en apparence incompatibles constitue un point d'intérêt majeur de ces deux séries d'expériences. Comme évoqué dans la section I.2.2, la révélation de cette contradiction apparente est possible grâce à l'originalité de ces expériences qui combinent à la fois l'hétérogénéité spatiale du substrat et celle des dégradeurs, en présence de mécanismes de transport multiples, tout cela dans des conditions expérimentales à la fois comparables et étroitement contrôlées, permettant de discriminer le rôle des différents facteurs.

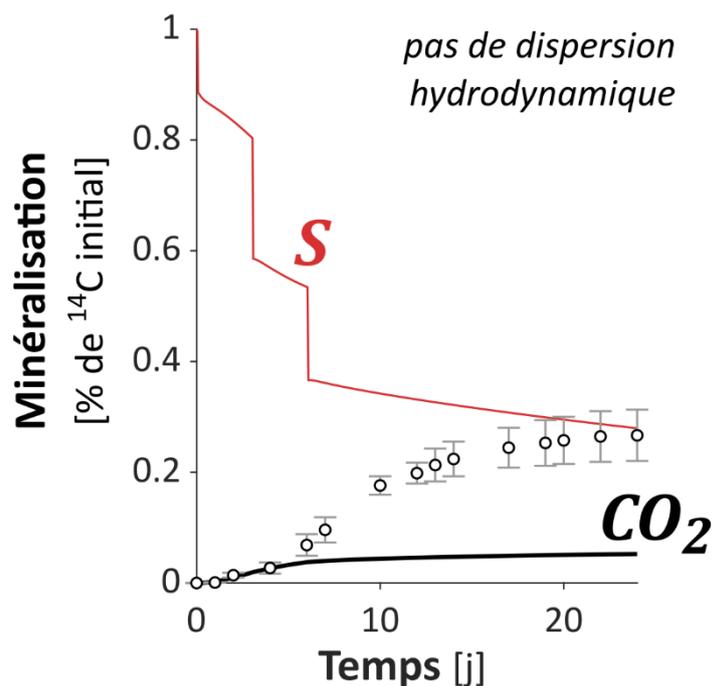


Figure II.5. Minéralisation prédite pour l'expérience disjointe avec percolation, en absence de mécanismes dispersifs. L'évolution de la masse de substrat restante dans la colonne de sol est indiquée en rouge, et l'évolution de la masse de CO₂ produite est indiquée en noire, à comparer aux données expérimentales représentées par les points.

Tableau 2. Valeurs calibrées des paramètres du modèle de transport bioréactif basé sur les expériences hydrostatiques (Babey et al., 2017).

Nom du paramètre	Symbole	Unité	Valeurs calibrées
Concentration initiale en substrat	$S(t=0)$	$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (masse de carbone du substrat par masse de sol sec)	0.825
Coefficient d'adsorption réversible	k_{SA}	j^{-1}	0.09207
Coefficient de désorption réversible	k_{AS}	j^{-1}	4.361
Coefficient d'absorption irréversible	k_C	j^{-1}	0.01296
Rendement de croissance	y	-	0.5206
Vitesse spécifique maximale d'absorption	$(1/y)\cdot\mu_{max}$	j^{-1}	1.2159
Efficacité maximale d'absorption	$(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa M$	$\text{g}\cdot\mu\text{g}^{-1}\cdot\text{j}^{-1}$ (masse de sol sec par masse de carbone bactérien par unité de temps)	2.6532 ^a
Vitesse d'accommodation	α	j^{-1}	0.9341
Densité initiale en bactéries	$B(t=0)$	$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (masse de carbone bactérien par masse de sol sec)	0.16133 ^b
Taux de mortalité	m_t	j^{-1}	0.0602
Taux de recyclage des nutriments	χ	-	0.6010
Coefficient de diffusion effectif	d_{diff}	$\text{m}^2\cdot\text{j}^{-1}$	$1 \cdot 10^{-5}$

^a La valeur de $(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa$ correspond à $2.8881 \cdot 10^2 \text{ l}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (volume d'eau par masse de bactéries par unité de temps)

^b La valeur de $B(t=0)$ correspond à $1.4821 \cdot 10^{-3} \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ (masse de bactéries par volume d'eau)

Points clés

- ▶ Présentation des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) et du modèle développé et calibré sur la première série d'expériences par Babey et al. (2017).
- ▶ La percolation entraîne une augmentation très marquée de la minéralisation dans les expériences colocalisée et disjointe, mais pas dans les expériences homogènes.
- ▶ Sans adaptation du modèle de transport, la calibration du modèle de transport bioréactif en conditions hydrostatiques ne permet pas de reproduire les résultats expérimentaux en conditions de percolation.
- ▶ Le mécanisme d'action de la percolation, en particulier à travers la dispersion suspectée, est ambigu.

II.2. Analyses préliminaires des données expérimentales

Afin de préciser le contenu informationnel des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) et d'orienter la construction du modèle, diverses analyses préliminaires ont été conduites. Cette étape facilite significativement la modélisation en permettant de différencier au préalable les variables contraintes par les conditions expérimentales de celles qu'on cherchera à contraindre par les résultats de minéralisation. Cette étape permet plus globalement d'identifier les postulats sur lesquels il sera choisi de bâtir le modèle.

II.2.1. Mobilité des espèces

Un point essentiel de la modélisation a résidé dans la détermination des espèces impactées par la percolation de l'eau dans la colonne de sol, qualifiées alors de « mobiles » à la résolution millimétrique. Étant donné sa forte diffusion observée dans les expériences hydrostatiques de Pinheiro et al. (2015), le substrat (^{14}C -2,4-D) a été considéré mobile par advection. Le 2,4-D est en effet un pesticide soluble fortement mobile dans le sol (Helling and Turner, 1968), du fait de sa forte solubilité ($22 \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ à 22°C (Boivin et al., 2005)), son fort coefficient de diffusion moléculaire ($6.9 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2\cdot\text{j}^{-1}$ (Saxena et al., 1974)) et son adsorption relativement lente sur les particules du sol. Les bactéries dégradant le 2,4-D ont également été considérées mobiles, en accord avec la présence de gènes *tfdA* détectés dans les cubes de sol voisins du cube initialement inoculé dans les expériences percolation de Pinheiro et al. (2018) (**Figure II.6**). Plusieurs travaux ont montré que la dispersion active des bactéries, appelée motilité, pouvait jouer un rôle important vis-à-vis de la dispersion de certaines espèces bactériennes dans les sols (Krüger et al., 2019). Néanmoins dans le système étudié ici, l'absence de dispersion des bactéries observée dans l'expérience sans percolation (**Figure II.6A**), ainsi que le faible potentiel hydrique des expériences (-31.6 kPa), ont conduit à considérer que la mobilité des bactéries était essentiellement passive, c'est-à-dire due aux déplacements des masses d'eau lors des épisodes de percolation. Enfin, la fraction de carbone insoluble dans l'eau, constituée du substrat adsorbé et des résidus biotiques a été quant à elle considérée immobile étant donné que, comme défini par Babey et al. (2017), elle correspond à la fraction du carbone non extractible par l'eau mesurée par Pinheiro et al. (2015).

Après avoir déterminé que le substrat et les bactéries dégradantes étaient transportées par advection, un second point a été de préciser la façon dont ces deux espèces étaient advectées.

Expériences hétérogènes colocalisées après 24 jours

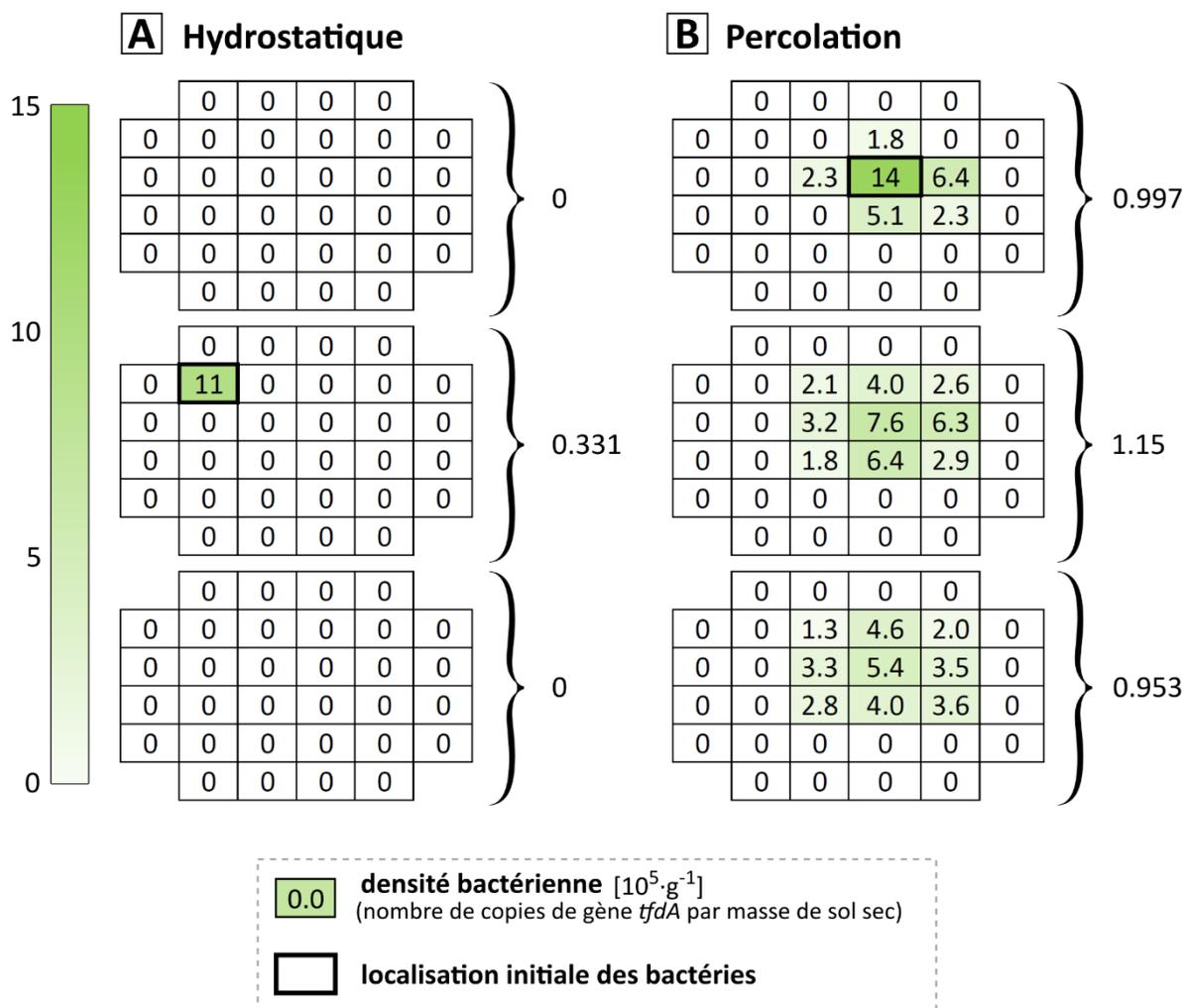


Figure II.6. Répartitions millimétriques finales des bactéries dégradantes du 2,4-D, dans l'expérience hétérogène colocalisée, en conditions hydrostatiques (A) et en percolation (B), après 24 jours. Les 96 cubes élémentaires des colonnes de sol sont représentés sur trois grilles correspondantes aux trois couches de sol. Les valeurs se réfèrent aux mesures finales du nombre de copies de gènes *tfdA*, aussi illustrées par l'échelle de couleur verte. Les nombres indiqués à droite des cartes représentent les densités moyennes par couche. Le cube avec les bordures épaisses indique la position initiale des bactéries. La limite de détection était $0.12 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$ (copies de séquences *tfdA* par masse de sol sec). Les conditions aux bords étaient réfléchissantes (pas de fuite de carbone) à l'exception du bas de la colonne en contact avec une plaque de céramique permettant le maintien du potentiel hydrique. Lors des événements d'irrigation, l'eau était

apportée en haut de colonne et s'écoulait vers les bas. Adaptée de Pinheiro et al. (2018). La permission pour la reproduction est accordée par Elsevier.

II.2.2. Modalités de transport du substrat et des bactéries

L'objectif est de reproduire correctement deux effets de la percolation susceptibles d'impacter la minéralisation, le premier étant la lixiviation¹ d'une partie du ^{14}C en dehors de la colonne de sol, le deuxième étant la redistribution des répartitions spatiales des espèces mobiles au sein de la colonne de sol. Ces deux effets proviennent des mêmes mécanismes de transport, cependant on postule qu'il est possible de les considérer de manière séparée tout en reproduisant fidèlement l'impact final de la percolation, ce qui permet de simplifier leur modélisation. En effet, les mécanismes d'advection-dispersion au sein de milieux non-saturés sont complexes et encore insuffisamment connus, et les données expérimentales disponibles sont parcellaires, ce qui empêche de connaître avec certitude les mécanismes exacts du transport des espèces mobiles. Il existe par ailleurs de nombreux modèles disponibles, souvent avec un nombre de paramètres à calibrer relativement élevé en comparaison aux données disponibles, ce qui rend leur choix difficile. Un modèle plus réaliste sera tout de même testé mais, dans un souci de parcimonie, les modèles réduits seront préférés, sous réserve qu'ils reproduisent correctement les effets visibles de la percolation.

II.2.2.1. Contenu informationnel des données de lixiviation

Dans un premier temps, les données de lixiviation ont été comparées afin de déterminer s'il était pertinent de considérer des différences de lixiviation en fonction des espèces ainsi qu'en fonction des répartitions spatiales initiales. Cette première information a permis de déterminer en partie les mécanismes en jeu. Les différences de quantité de ^{14}C lixivié pouvaient être causées par deux raisons identifiées : des différences de localisation du ^{14}C ou des différences de quantités de $^{14}\text{C-S}$ et de $^{14}\text{C-B}$ dans la colonne de sol au moment des lixiviations.

La comparaison entre le traitement hétérogène disjoint (**Figure II.7C**) et le traitement hétérogène colocalisé (**Figure II.7D**) semble indiquer que la répartition du ^{14}C au moment des lixiviations joue un rôle dans la quantité lessivée. En effet, la métabolisation du substrat en CO_2 et biomasse est sensiblement similaire sur les six premiers jours entre ces deux traitements, et le ^{14}C est initialement présent au même endroit dans ces deux traitements, mais les quantités lessivées diffèrent. On peut alors supposer que la différence de masse de ^{14}C lessivée (58.5% contre 50.7%) est liée à la différence de position initiale des bactéries. Du

¹ Bien que pouvant désigner au sens général tout phénomène d'entraînement par l'eau, le terme de *lixiviation* est souvent utilisé pour désigner spécifiquement le transport de solutés par advection dans le sol. L'entraînement de particules solides par l'eau est alors désigné sous le terme de *lessivage*. Dans ce manuscrit, par soucis de simplicité, l'entraînement par l'eau d'espèces dissoutes ou particulaires hors de la colonne de sol sera désigné indistinctement sous le terme de *lixiviation* (en anglais : *leaching*).

fait de la position initiale des bactéries, on peut supposer que l'incorporation du ^{14}C dans la biomasse s'effectue principalement dans la couche supérieure dans le traitement colocalisé (**Figure II.7D**), tandis qu'elle s'effectue plus proche de la couche inférieure dans le traitement disjoint (**Figure II.7C**). Inversement, la couche inférieure serait plus riche en substrat dissout dans le traitement colocalisé que dans le traitement disjoint, étant donné son incorporation dans la biomasse, conduisant à une localisation des bactéries plus basse et une localisation du substrat plus haute dans le traitement disjoint que dans le traitement colocalisé, comme conceptualisé sur la **Figure II.7F**. Le fait que la configuration du traitement disjoint favorise la lixiviation suggèrerait les hypothèses selon lesquelles la proximité des espèces en solution avec le bas de la colonne de sol faciliterait la lixiviation, et les bactéries seraient lessivées plus facilement que le substrat.

Néanmoins, ces hypothèses ne peuvent être que spéculatives, et la métabolisation du substrat pendant les 6 premiers jours est trop limitée (7%) pour en tirer des conclusions robustes. Par ailleurs, les écarts-types des valeurs de lixiviation sont trop grands et les valeurs trop proches, pour que les différences entre traitements soient significatives. Enfin la comparaison avec les autres traitements ne permet pas de faire ressortir de tendances significatives. Pour ces raisons, plusieurs modalités de lixiviation seront testées dans les criblages : la lixiviation des bactéries sera testée comme étant nulle, égale à celle du substrat (en proportion) ou comme étant le double, en gardant à l'esprit que la différence de lixiviation en fonction de l'espèce considérée est possible mais limitée. Egalement, en première approximation, la lixiviation sera considérée comme spatialement homogène. C'est une approximation pertinente étant donné que, en milieu non-saturé, la lixiviation provient majoritairement d'un écoulement rapide à travers les pores larges, sur des distances largement supérieures à la hauteur de la colonne de sol (3 cm). Cette hypothèse simplifie fortement la modélisation car elle permet de découpler la modélisation de la lixiviation en dehors de la colonne, de celle de la dispersion des espèces mobiles à l'intérieur de la colonne. Enfin, cette question est liée à celle du déplacement vertical des espèces mobiles à l'intérieur de la colonne. Comme traité dans la section suivante (II.2.2.2), cet aspect ne doit pas affecter la réponse à la question d'étude.

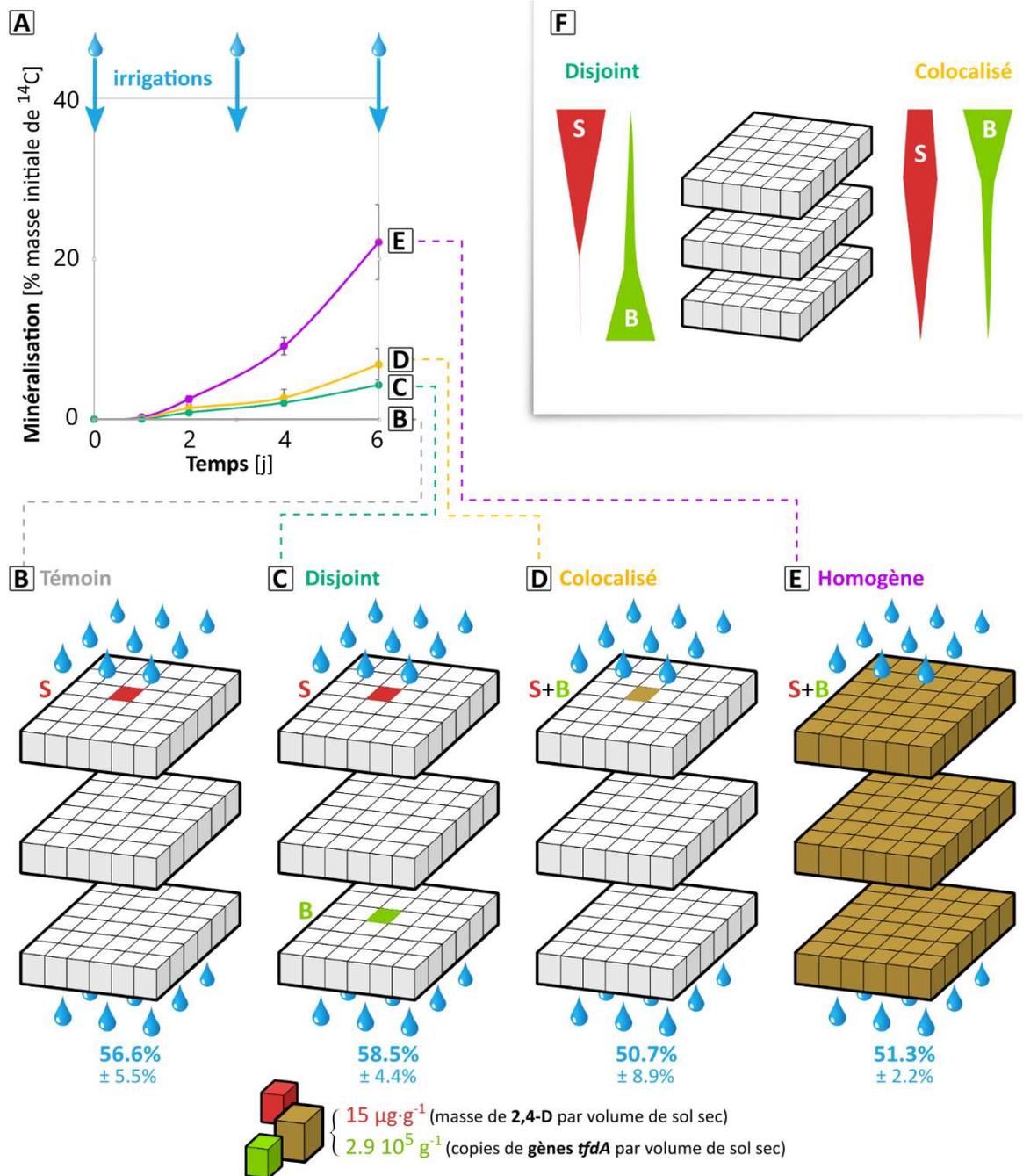


Figure II.7. Quantités de ^{14}C initial lessivées pour chaque répartition initiale de substrat (*S*, en rouge) et de bactéries (*B*, en vert). (**B**) se rapporte au témoin avec du substrat seul, (**C**) se rapporte à l'expérience hétérogène colocalisée, (**D**) se rapporte à l'expérience hétérogène disjointe et (**E**) se rapporte à l'expérience homogène. (**F**) représente schématiquement les répartitions attendues de substrat et de bactéries sur les six premiers jours. Dans l'expérience disjointe, le substrat est supposé être localisé plus haut, et les bactéries plus basses, que dans l'expérience colocalisée.

II.2.2.2. Contenu informationnel des données de répartitions finales au sein des colonnes de sol

Dans l'expérience avec les bactéries et le substrat initialement colocalisés, la carte des répartitions finales des copies de gènes *tfdA*, correspondant aux densités de bactéries dégradantes, montre une répartition des bactéries relativement homogène dans les trois couches de sol (**Figure II.8A**). Cette répartition est également semblable à la répartition finale du substrat dans l'expérience témoin sans bactéries. Ce type de répartition semble montrer que la percolation engendre une forte dispersion mêlée d'un déplacement advectif vers le bas. En effet, si le transport était principalement dispersif, on s'attendrait plutôt à un gradient descendant de la 1^{re} couche vers la dernière. Cela est en revanche le cas pour le substrat dans l'expérience « colocalisée » (**Figure II.8B**). Il apparaît ainsi que la composante verticale du déplacement causé par la percolation n'est pas clairement caractérisable, et que la dispersion joue un rôle majeur, suggérant des mécanismes complexes de transport comme cela peut être le cas pour de la percolation à faible flux dans des milieux poreux non-saturés. Pour la modélisation, les données de lixiviation furent considérées préférentiellement à celles des répartitions finales de bactéries. D'autre part, en dehors de la lixiviation, le déplacement vertical du substrat et des bactéries au sein de la colonne ne peut conduire, au mieux qu'à un impact neutre sur la probabilité de rencontre entre les deux, au pire à une baisse de la probabilité de rencontre si le substrat et les bactéries sont transportées à des vitesses différentes. Au vu de la difficulté à atteindre le niveau de minéralisation observé dans les données expérimentales (voir section II.4.1), il a été considéré en première approximation que la probabilité de rencontre entre les bactéries et leur substrat n'était pas entravée par leur déplacement vertical, c'est-à-dire que les bactéries et le substrat se déplaçaient à une vitesse identique. Sous cette hypothèse, le déplacement vertical des deux espèces a un impact neutre sur la probabilité de rencontre et peut être négligé dans la modélisation.

Expérience hétérogène colocalisée en percolation

après 24 jours

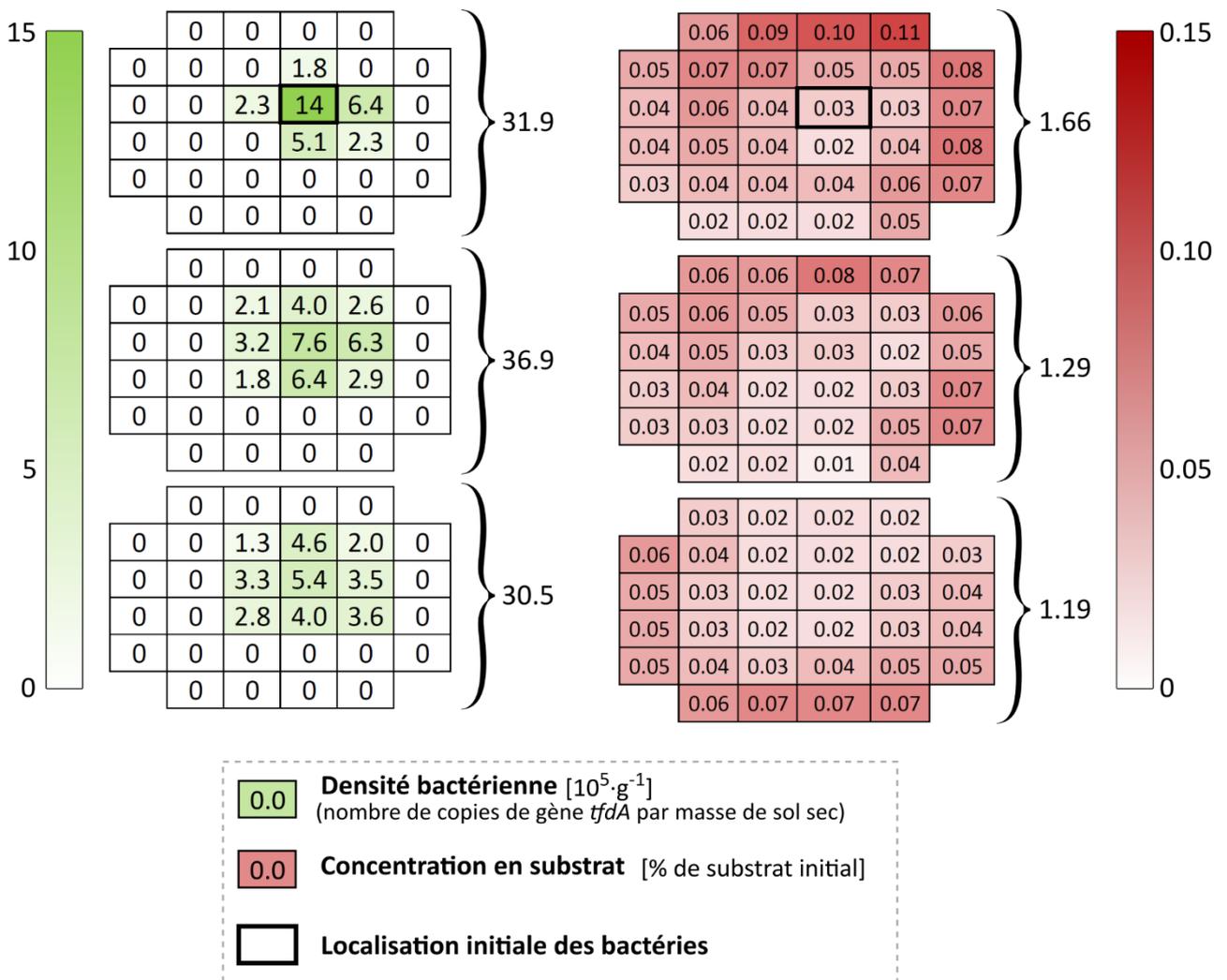


Figure II.8. Carte de répartition des densités de copies de gènes *tfdA* (A) et du ^{14}C -2,4-D (B) pour l'expérience colocalisée avec percolation, au jour 24. Les valeurs indiquées à droite des cartes représentent les densités moyennes par couche (A) ou la masse totale de substrat par couche exprimée en % de la masse initiale (B), respectivement.

II.2.3. Incertitude sur la vitesse maximale globale de minéralisation

Les données expérimentales de minéralisations ont été recueillies chaque jour, ou un jour sur deux ou sur trois. Cette fréquence d'acquisition entraîne une incertitude sur la dynamique précise de minéralisation, en particulier sur la vitesse maximale globale de minéralisation de l'expérience homogène avec percolation (**Figure II.9**). Or la vitesse maximale globale de minéralisation fournit un renseignement important sur la dynamique de la population de dégradeurs microbiens (**Figure II.10**). Une vitesse maximale globale élevée correspond à une cinétique de minéralisation de type exponentielle tandis qu'une faible vitesse maximale globale correspond à une cinétique de minéralisation de type

linéaire. D'après les équations du modèle de Monod (Éq 2 et Éq 4), une minéralisation exponentielle résulte d'un fort accroissement de la population microbienne, tandis qu'une minéralisation linéaire provient d'une population microbienne qui reste relativement constante.

Pour pouvoir différencier ces deux types de cinétiques, il aurait fallu au minimum avoir une acquisition quotidienne de points expérimentaux entre les jours 2 et 6, et idéalement plusieurs acquisitions par jour. Pour cette raison, la vitesse maximale globale de minéralisation sera un critère d'analyse des dynamiques bactériennes mais ne sera pas utilisée pour évaluer l'adéquation entre les simulations et les données expérimentales.

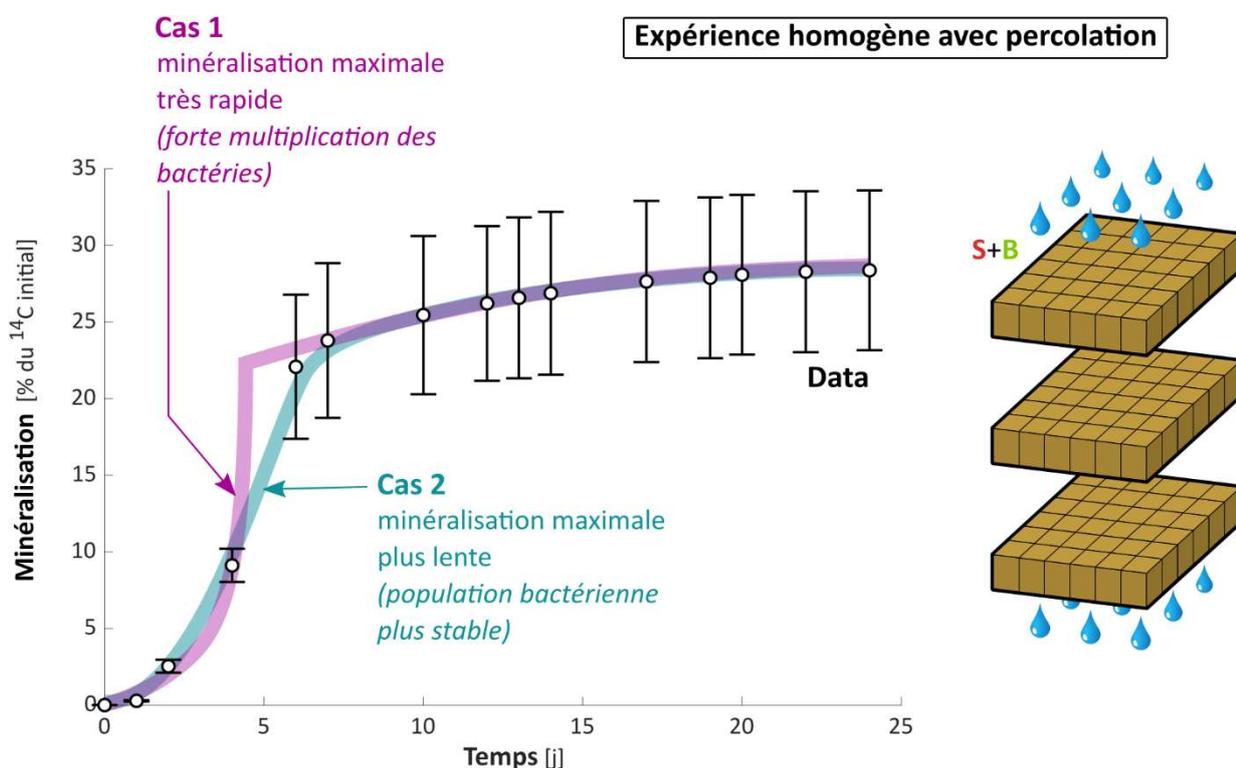


Figure II.9. Scénarii possibles de minéralisation sur l'expérience homogène avec percolation. Les points blancs entourés de noir et les barres d'erreur en noir correspondent aux données expérimentales. Les courbes rose et bleue correspondent à deux cinétiques possibles de minéralisation, en accord avec les données.

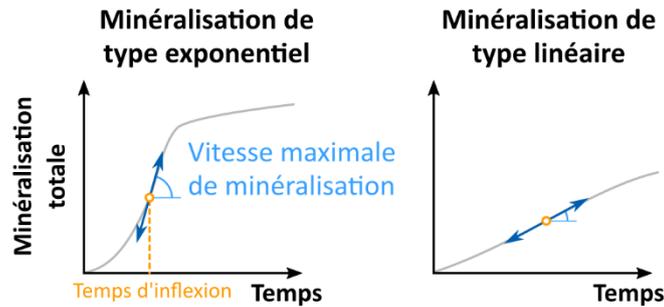


Figure II.10. Représentation de la vitesse maximale globale de minéralisation comme dérivée de la minéralisation en fonction du temps au point d'inflexion de la courbe temporelle de minéralisation.

Points clés

- ▶ Les données de lixiviation et de répartition spatiale ne sont pas assez robustes et contrastées pour se prononcer sur le détail des mécanismes de transport.
- ▶ Les hypothèses les plus simples seront préférées, comme considérer que la quantité lixiviée ne dépend pas de la position, et que le substrat et les bactéries sont transportés par les mêmes processus et avec les mêmes paramètres.
- ▶ La sensibilité de ce dernier point sera évalué.

II.3. Conception et exploration des modèles de transport

La première orientation de ce travail de thèse a été d'élaborer un modèle de transport advectif-dispersif, rendant compte de la percolation à l'œuvre dans les expériences de Pinheiro et al. (2018). L'idée sous-jacente était alors que les processus de transport étaient les facteurs explicatifs des écarts de minéralisation observés. Les incertitudes vues dans la section précédente quant à la caractérisation des mécanismes de transport a renforcé le besoin de chercher le modèle le plus simple.

Bien qu'un certain nombre de solutions analytiques aient été développées pour déterminer le profil spatial de substrat dans des systèmes combinant diffusion et dégradation du substrat (Crank, 1975; Koch, 1971, voir aussi section IV.4.4), ces solutions ne prennent généralement pas en compte les particularités de la relation entre la vitesse de croissance des bactéries et la concentration en substrat lorsque cette relation suit une loi de Monod (relation concave vers le bas). De plus, ni la dynamique de population des bactéries ni le déplacement des bactéries ne sont pris en compte. Cette complexité biologique et physique impose la nécessité de développer un modèle numérique de transport bioréactif.

II.3.1. Modèle eulérien simple d'advection

La toute première hypothèse a consisté à expliquer l'impact positif de la percolation sur la minéralisation dans l'expérience disjointe par le fait que l'advection du substrat depuis sa position initiale, en haut de la colonne de sol, vers la position initiale des bactéries, en bas de la colonne (voir **Figure II.1B**), permettrait de favoriser le contact entre bactéries et substrat. En effet, l'advection a la capacité de déplacer des masses de substrat vers les bactéries, en s'affranchissant dans une certaine mesure de l'effet limitant de la dilution (Babey et al., 2017).

Pour vérifier cette hypothèse, un premier modèle de transport simplifié a été développé, permettant de modéliser l'advection pure du substrat uniquement. La percolation a été modélisée par une advection eulérienne du substrat plan par plan, associée à un coefficient de partition P déterminant la fraction de substrat transportée d'un plan au plan sous-jacent (**Figure II.11**). Lorsque le substrat présent sur le troisième plan est transporté par advection, il est lixivié hors de la colonne de sol.

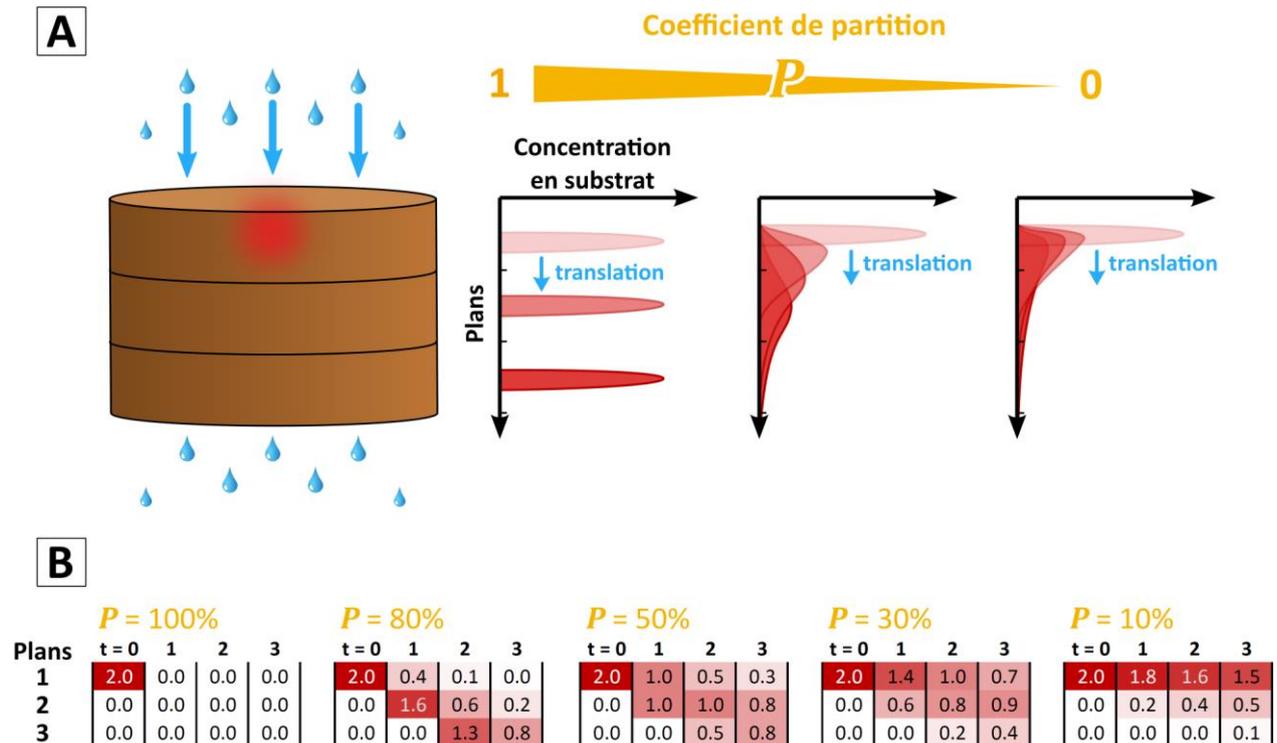


Figure II.11. Modèle d'advection eulérienne plan par plan. Le substrat est représenté en rouge et est initialement concentré dans un cube de la colonne de sol (A). En fonction du coefficient de partition P , la répartition verticale du substrat va suivre différents motifs (B).

Les résultats sont représentés pour différents coefficients de partition sur la **Figure II.12**, pour l'expérience disjointe mais également pour l'expérience colocalisée. Ces résultats montrent bien que l'advection du substrat est capable de rapprocher des bactéries dans l'expérience disjointe. La minéralisation est maximale lorsque 100% du substrat migre d'un plan au plan sous-jacent à chaque irrigation, l'essentiel de la dégradation ayant alors lieu entre le 2^e et le 3^e épisode d'irrigation. Néanmoins, cette situation ne permet au mieux que d'atteindre une minéralisation finale de l'ordre de 6% du substrat initial, significativement inférieure aux 11% observés dans les expériences. Cela pourrait néanmoins s'expliquer par la surestimation du substrat lixivié, et être corrigé par une amélioration du modèle d'advection.

Néanmoins, l'impact de ce type d'advection sur la minéralisation est opposé selon que la répartition spatiale initiale du substrat et des bactéries est colocalisée (**Figure II.12A**) ou disjointe (**Figure II.12B**). Cet aspect souligne le rôle variable que peut jouer le transport vertical en fonction des répartitions initiales. Un deuxième constat, plus surprenant, ressort des simulations de l'expérience colocalisée. Peu importe la fraction P du substrat soumise à advection, il n'y a pas d'adéquation entre les simulations et les données expérimentales pour cette expérience. Même en absence d'advection du substrat, la minéralisation ne dépasse pas 20% du substrat non-lixivié, loin des 50% observés dans les expériences. Cette divergence entre résultats expérimentaux et numériques met à nouveau en évidence le

caractère complexe de l'augmentation de la minéralisation observée dans l'expérience colocalisée avec percolation. Bien que, dans le cas de l'expérience disjointe, la minéralisation semble déterminée par le temps de contact entre le cube initialement amendé en bactéries et les plus hautes concentrations en substrat, cela ne semble pas être le cas pour l'expérience colocalisée.

Ce constat place l'expérience colocalisée avec percolation au cœur de la problématique d'investigation du rôle des mécanismes de transport dans la minéralisation. La compréhension des mécanismes en jeu dans l'expérience colocalisée avec percolation constituera l'enjeu principal dans la suite de ce travail.

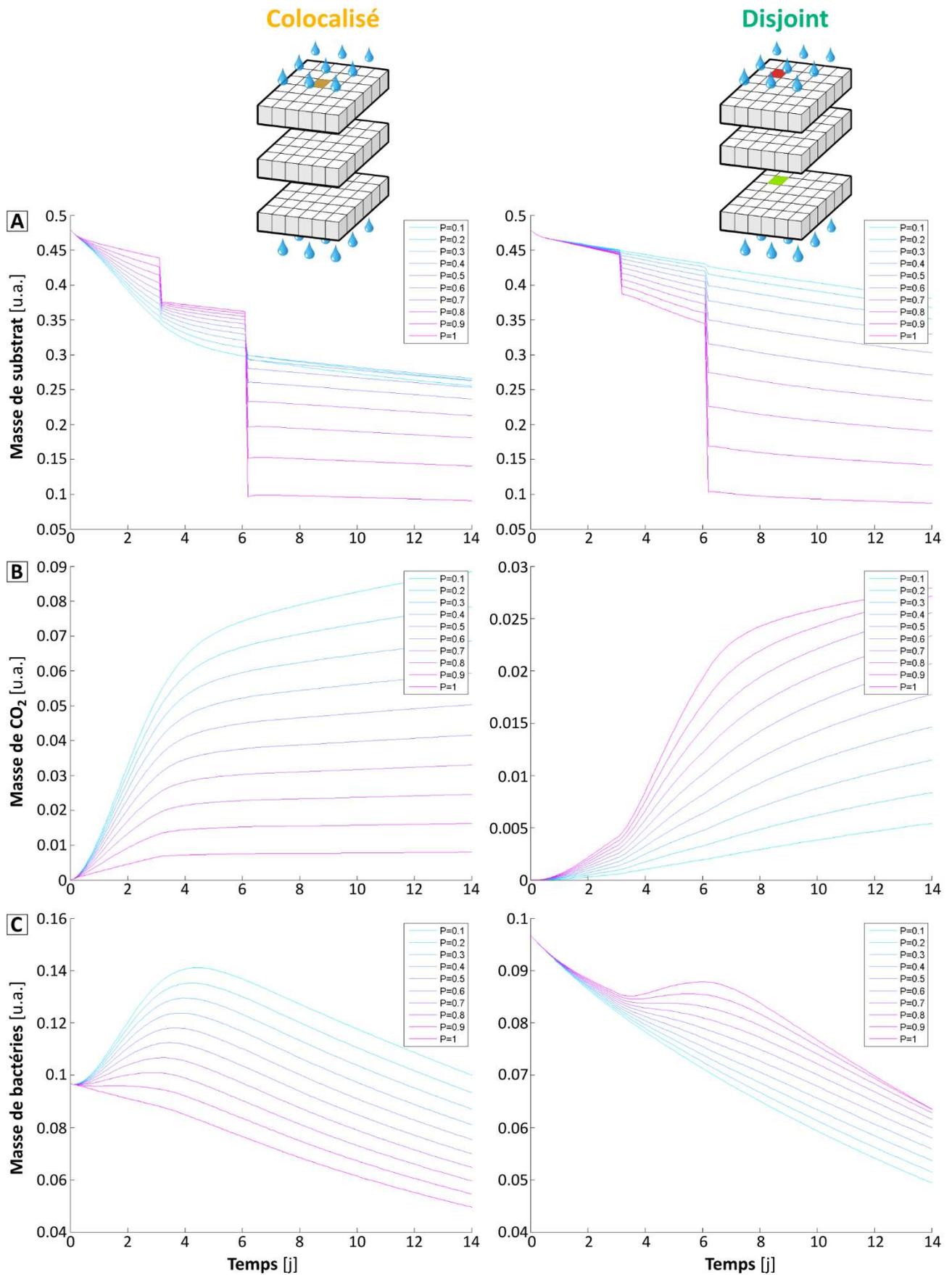


Figure II.12. Dynamiques d'évolution de la quantité totale de substrat (A), de la minéralisation (B) et de la masse totale de dégradeurs bactériens (C) en fonction du coefficient de partition, pour

les expériences colocalisée et disjointe avec percolation. L'échelle de couleur indique, du bleu au rose, l'augmentation du coefficient de partition P .

II.3.2. Rôle restreint du modèle de transport

Pour se prémunir contre les biais de simplification du modèle précédent, le modèle de transport a été complexifié pour gagner en réalisme, jusqu'au développement d'un modèle lagrangien d'advection-dispersion à compartimentation mobile-immobile. Dans ce type de modèle, le transport des espèces mobiles est réalisé selon une méthode de marche aléatoire dans le domaine des temps (*Time-Domain Random Walk*), permettant de résoudre le transport advectif-dispersif sans discrétisation temporelle.

Pourtant, malgré un certain nombre de développements et d'exploration de valeurs de paramètres, il est apparu que ce type de modèle ne permettait en aucun cas de prédire une minéralisation plus grande en conditions d'irrigation. Peu importe les paramètres choisis pour les processus de transport, ce modèle, une fois couplé au modèle bioréactif calibré en hydrostatique, n'a pas la capacité de reproduire les données expérimentales. L'absence de résultats probants au fur et à mesure du développement de ce modèle réaliste suggère que ni le transport vertical, ni la complexité du modèle de transport ne sont déterminants pour expliquer les résultats expérimentaux de Pinheiro et al. (2015, 2018). Ce constat a imposé de rechercher d'autres facteurs explicatifs et à s'intéresser au rôle des paramètres bactériens.

Points clés

- ▶ Le déplacement vertical du substrat par advection dans la colonne de sol semble permettre d'expliquer la minéralisation de l'expérience disjointe en percolation, mais cela rend encore plus difficile l'explication de la minéralisation de l'expérience colocalisée en percolation.
- ▶ La priorité du modèle a été donnée à l'explication du comportement des expériences colocalisées.
- ▶ Contrairement à ce qui était envisagé initialement, la capacité à reproduire les résultats expérimentaux de Pinheiro et al. (2015, 2018), en particulier vis-à-vis de l'impact de l'irrigation sur les expériences colocalisées, ne dépend pas du modèle de transport.

II.4. Mise en cause du rôle potentiel de l'interaction entre la spatialité et les traits biologiques bactériens

II.4.1. Mise en évidence de la difficulté à reproduire les données

Une analyse rudimentaire de sensibilité des simulations aux paramètres bactériens montre que l'impact des répartitions spatiales sur la dégradation dépend des traits bactériens. Les résultats sont présentés sur la **Figure II.13** pour le jeu de paramètres calibré sur les expériences hydrostatiques (**Figure II.13A** et **B**, en vert), ainsi que pour deux autres jeux de paramètres, reproduisant une vitesse d'absorption bactérienne μ/y respectivement pseudo-proportionnelle à la concentration en substrat (**Figure II.13A** et **C**, en orange), ou au contraire pseudo-indépendante de la concentration en substrat (**Figure II.13A** et **D**, en violet). Les paramètres de Monod correspondants sont représentés sur la **Figure II.13A**. Dans l'expérience avec percolation, les densités en bactéries sont homogénéisées dans toute la colonne de sol dès la 1^{re} irrigation. La minéralisation rapportée à la quantité de substrat non-lixiviée est défavorisée par la dispersion pour la calibration hydrostatique et le modèle pseudo-proportionnel, mais favorisée pour le modèle pseudo-indépendant. Ces premiers résultats suggèrent que le caractère positif ou négatif de la dispersion sur la dégradation dépend, entre autre, de l'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$. Néanmoins, les bactéries modélisées avec une forte efficacité maximale d'absorption deviennent alors trop efficaces dans l'expérience colocalisée sans dispersion (**Figure II.13D**, rangée du haut).

Afin de généraliser les résultats précédents, une première série d'expériences numériques a été réalisée. L'objectif était de déterminer l'impact de la dispersion des bactéries et du substrat sur la minéralisation, en fonction des valeurs de paramètres bactériens. La dispersion a été modélisée de manière simplifiée en imposant une répartition initiale des bactéries et du substrat plus ou moins étalée (**Figure II.14**). Le lessivage d'une partie du substrat était appliqué de manière homogène à l'ensemble de la colonne de sol à chaque évènement d'irrigation. L'adéquation avec les données a été déterminée de manière simplifiée en évaluant deux propriétés de la cinétique de minéralisation : l'amplitude de minéralisation atteinte au bout de 14 jours, et le temps d'inflexion de la cinétique de minéralisation tel que défini dans la **Figure II.10**. Ces deux critères fournissent une information suffisante, dans un premier temps, pour comparer le comportement des systèmes simulés à celui des données expérimentales.

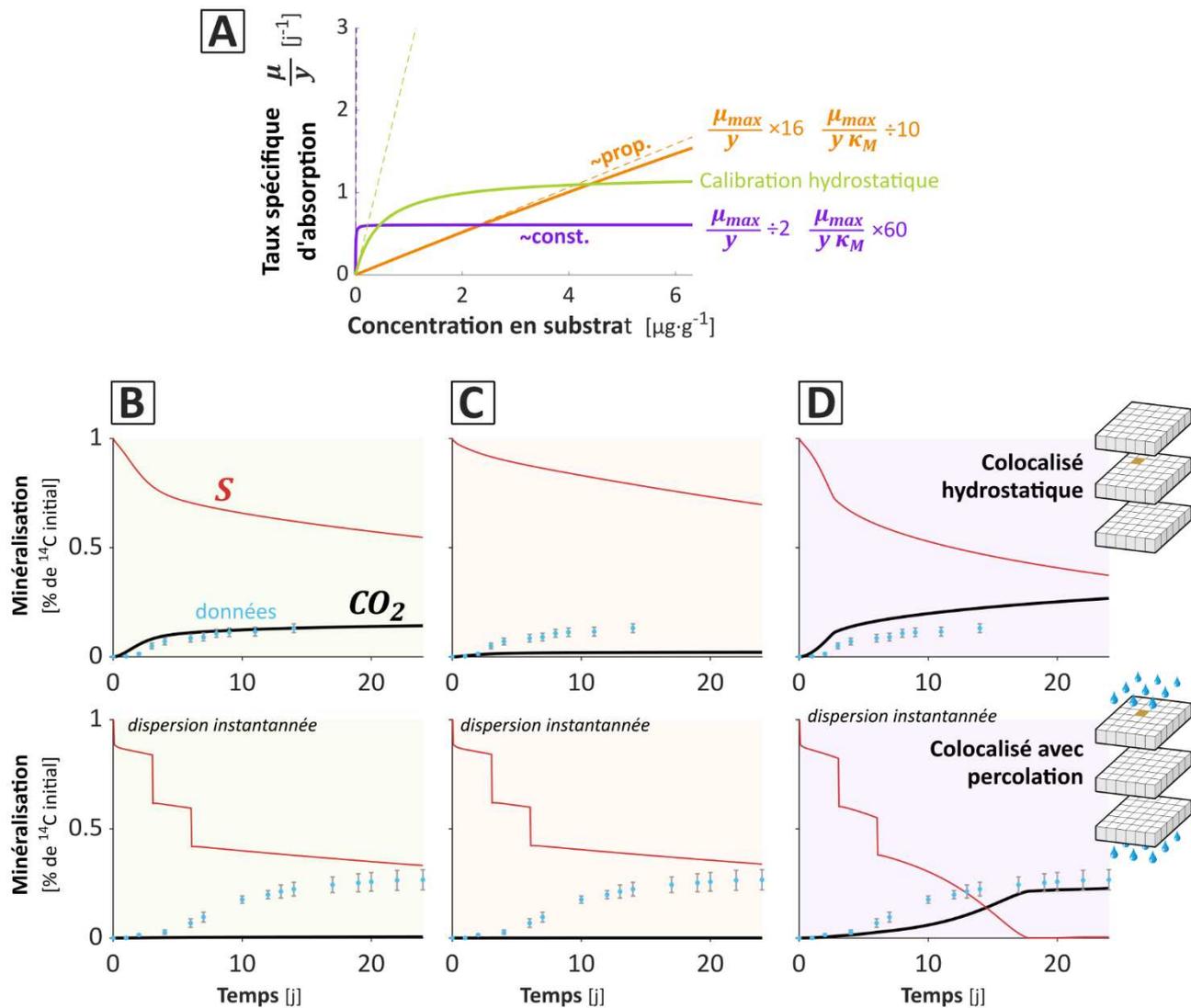


Figure II.13. Performances prédictives de trois jeux de paramètres caractéristiques. La relation de Monod pour chacune de ces trois paramétrisations est représentée sur le graphique (A). Les paramètres sont comparés à la calibration hydrostatique. Tout autre paramètre est identique par ailleurs. Le jeu de paramètre représenté en orange (C) correspond à une relation pseudo-proportionnelle entre μ et S . Le jeu de paramètre représenté en violet (D) correspond à une relation pseudo-indépendante de μ et S . La dispersion utilisée dans l'expérience avec percolation (rangée du bas, B, C, D) est une dispersion instantannée, ce qui signifie que les bactéries et le substrat sont répartis uniformément dans la colonne de sol dès la première irrigation.

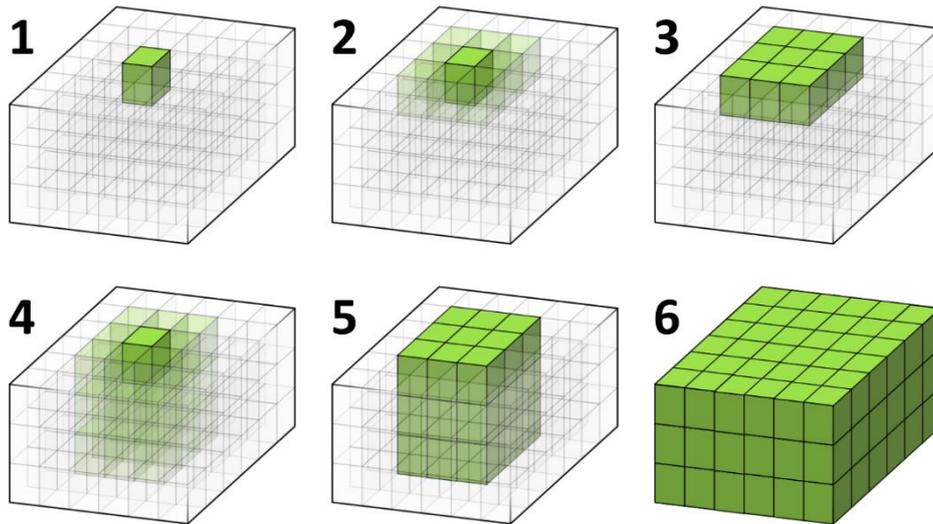


Figure II.14. Modélisation simplifiée de la dispersion. Les six schémas représentent les six degrés de dispersion initiale numérotés de 1 à 6. La dispersion est modélisée par un étalement initial plus ou moins large des espèces mobiles (substrat et bactéries). La masse initiale des espèces mobiles est répartie dans les cubes verts. Les cubes verts transparents accueillent une concentration initiale d'espèces mobiles diminuée de moitié par rapport aux cubes verts opaques. Les cubes gris transparents sont exempts de bactéries tout au long de l'expérience, mais peuvent recevoir du substrat par diffusion pendant l'expérience.

Parmi les nombreux jeux de paramètres explorés, la **Figure II.15** représente cinq jeux de paramètres pour lesquels la minéralisation simulée était en adéquation avec les données pour l'expérience colocalisée hydrostatique. Ces jeux de paramètres incluent ainsi la calibration hydrostatique déterminée par Babey et al. (2017). Les résultats montrent que les jeux de paramètres répondent très différemment à la dispersion. La plupart des jeux de paramètres testés induisent une minéralisation qui diminue lorsque la dispersion initiale augmente, comme le jeu de paramètres représenté en bleu, présentant un μ_{max} $2.8\times$ inférieur à celui calibré en hydrostatique et un κ_M $5.6\times$ inférieur, c'est-à-dire une efficacité maximale d'absorption $(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa_M$ $2\times$ supérieure. Au contraire, certains induisent une minéralisation qui augmente avec la dispersion, comme le jeu de paramètres représenté en vert présentant une efficacité maximale d'absorption $200\times$ supérieure et un délai d'accommodation négligeable, contrebalancés par une densité initiale de population $B(t=0)$ $100\times$ plus faible. Plus généralement, il ressort de cette série de tests que certains paramètres comme μ_{max}/y , $(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa_M$, $B(t=0)$ ou α , modulent significativement l'impact de la dispersion tandis que d'autres comme y ou m_t ont un impact faible ou indépendant de la dispersion. Malgré tout, aucun jeu de paramètres testé n'a permis d'atteindre la cinétique expérimentale.

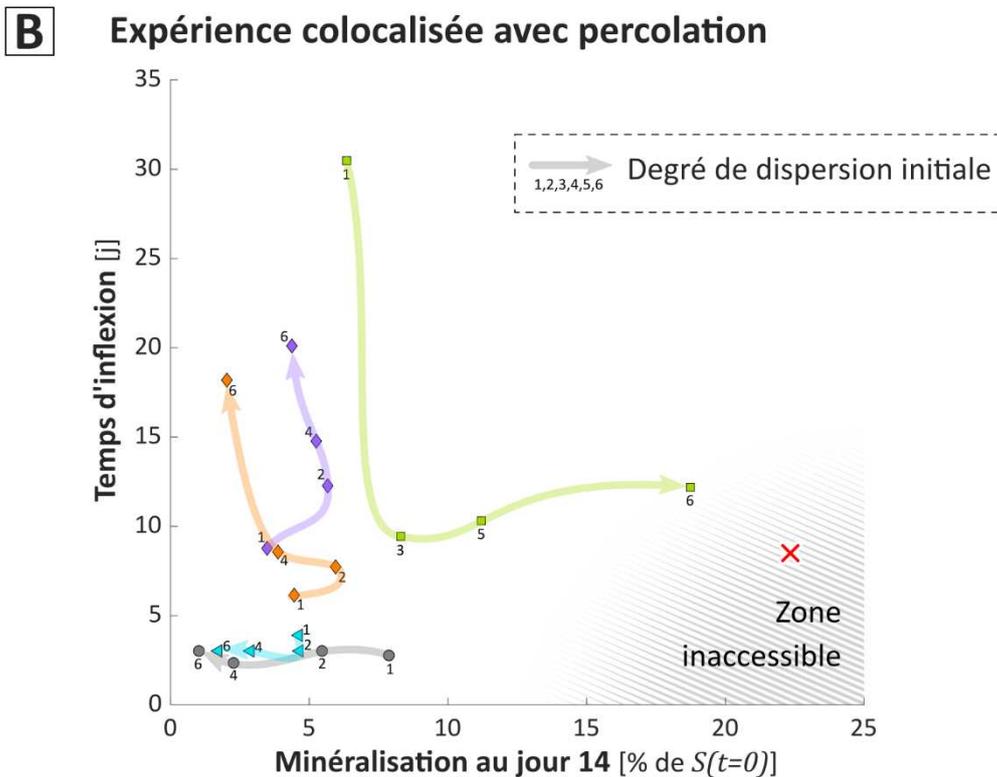
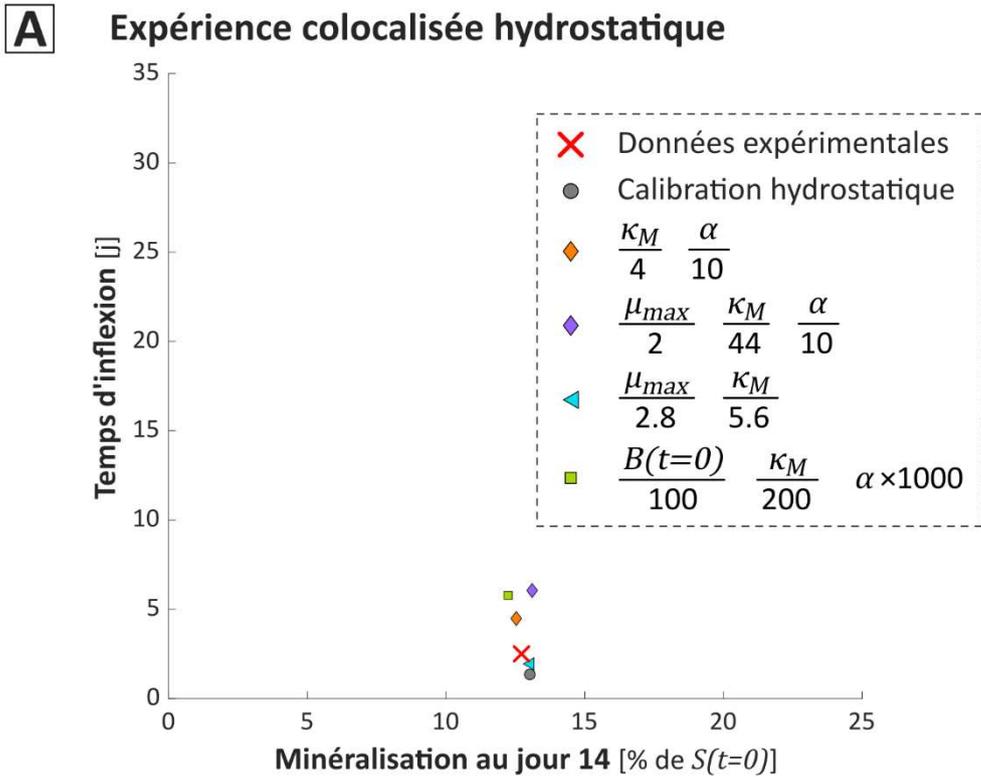


Figure II.15. Illustration de l'impact de la dispersion initiale des bactéries et du substrat pour cinq jeux de paramètres. Les deux graphiques représentent en abscisse et en ordonnée respectivement la quantité de $^{14}\text{CO}_2$ produite au bout de 14 jours et le temps d'inflexion de la courbe de minéralisation, pour les données expérimentales (croix rouge), pour le jeu de paramètres calibré en hydrostatique (noir), et pour quatre variations de ce jeu de paramètres

(orange, violet, bleu, vert). Ces quatre jeux de paramètres ont été choisis du fait de leur bonne capacité à reproduire les observations expérimentales en hydrostatique (**A**). Le degré de dispersion (**B**) était modélisé par six modalités de répartition initiale des bactéries et du substrat : colocalisés dans un seul cube de cube (1), étalés plus ou moins fortement dans les 9 cubes adjacents (2 et 3), étalés plus ou moins fortement dans 27 cubes adjacents (4 et 5), répartis de manière uniforme dans l'ensemble des cubes (6). Au vu de l'ensemble des simulations, il a semblé en première approche qu'une zone du graphique, signalée en gris, était inatteignable.

Ces résultats ont constitué un point charnière dans la compréhension des observations expérimentales de (Pinheiro et al., 2018), en mettant en évidence le rôle variable de la dispersion des bactéries en fonction de leurs traits biologiques. La dispersion défavorise la minéralisation dans certains cas tandis qu'elle la favorise dans d'autres. L'impossibilité apparente à reproduire les données suggère dans un premier temps d'étudier des causes alternatives de l'augmentation de la minéralisation induite par la percolation dans les expériences colocalisées.

II.4.2. Exploration et élimination des scénarios alternatifs

En premier lieu, comme cela a été étudié dans les sols et dans d'autres contextes, la teneur en eau peut impacter les concentrations en solutés, voire directement la physiologie des bactéries (Poirier et al., 1997; Grant, 2004; Schimel, 2018). Néanmoins, étant donné le caractère court et transitoire des épisodes d'advection et le caractère modéré du potentiel hydrique en dehors des périodes d'advection (-31.6 kPa), le rôle de ces processus a été écarté. Plus généralement, l'effet des variations de la teneur en eau sur les concentrations n'a pas été considéré, du fait de la brièveté des épisodes d'irrigation et en accord avec l'absence d'effet détectable sur les cinétiques expérimentales de minéralisation.

La grande similitude de la cinétique de minéralisation des deux expériences homogènes, avec ou sans percolation, indique que ce n'est pas la percolation en général qui explique la différence de minéralisation des deux expériences colocalisées mais plutôt un facteur spécifique à l'expérience colocalisée en percolation, c'est-à-dire lié à la dispersion observée à l'échelle macroscopique (voir **Tableau 1**). Ce critère permet a priori d'éliminer tous les facteurs explicatifs potentiels qui ne sont pas en rapport avec la dispersion macroscopique, soit du substrat, soit des bactéries, soit d'un composé non mesuré. Les processus restants regroupent donc la dispersion macroscopique et les processus qui interagissent potentiellement avec elle, comme par exemple la différence de concentration initiale en substrat ou la mise en contact des bactéries dispersées avec les débris cellulaires propres aux cubes irradiés.

II.4.2.1. Influence de la concentration en substrat perçue par les bactéries dispersées

Une première hypothèse a reposé sur l'effet de la saturation de l'activité bactérienne par le substrat, telle qu'étudiée par Shi et al., (2021) et introduite dans la section I.2.1. En effet, lorsqu'elles sont exposées à de fortes concentrations en substrat, les bactéries dégradent

plus de substrat en valeur absolue, mais moins de substrat en proportion, du fait de la convergence de leur vitesse spécifique maximale d'absorption μ/y vers μ_{max}/y . L'activité des bactéries dispersées seraient ainsi moins limitée par l'effet saturant de la concentration en substrat.

Néanmoins, d'une part, à la différence de l'étude de Shi et al., l'hétérogénéité des répartitions spatiales porte à la fois sur le substrat et sur les bactéries dans les expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018), comme le montre la **Figure II.16**. Cela représente une différence majeure, car malgré l'effet de saturation par le substrat, la somme des activités bactériennes est toujours supérieure lorsque les bactéries sont localisées à l'endroit des hautes concentrations en substrat. Par ailleurs, les concentrations maximales en 2,4-D des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) sont 300× plus faibles que celles de Shi et al. (2021) (masse de carbone par masse de sol sec), ce qui laisse à penser que le substrat n'est pas saturant.

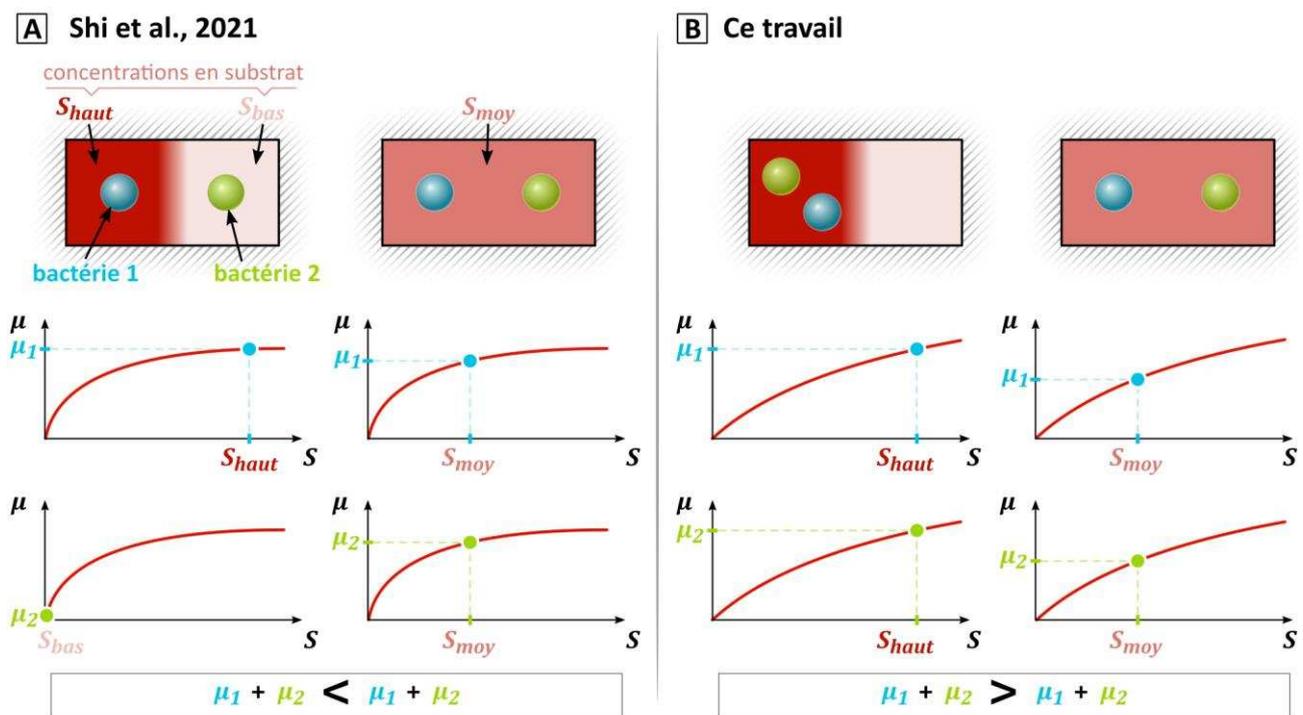


Figure II.16. Comparaison des expériences de Shi et al. (2021) (A) et des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) utilisées dans cette thèse (B) et rôle opposé de la dispersion. La saturation désigne la saturation de la vitesse de croissance μ par la concentration en substrat S . Deux bactéries sont représentées (sphères bleues et vertes). Le substrat est représenté en rouge. La dégradation globale qui émane des deux bactéries correspond à la somme de leurs activités μ indiquée dans les encadrés en bas.

Enfin, la concentration initiale en substrat dans les expériences en percolation est 7× plus élevée que dans les expériences hydrostatiques. Comme le montre la **Figure II.17**, les concentrations maximales perçus par les bactéries dans l'expérience hydrostatique colocalisée sont relativement faibles, d'autant plus si on ajoute la dégradation du substrat.

Ces faibles concentrations se situent dans le régime « pseudo-proportionnel » du modèle de Monod calibré sur ces expériences.

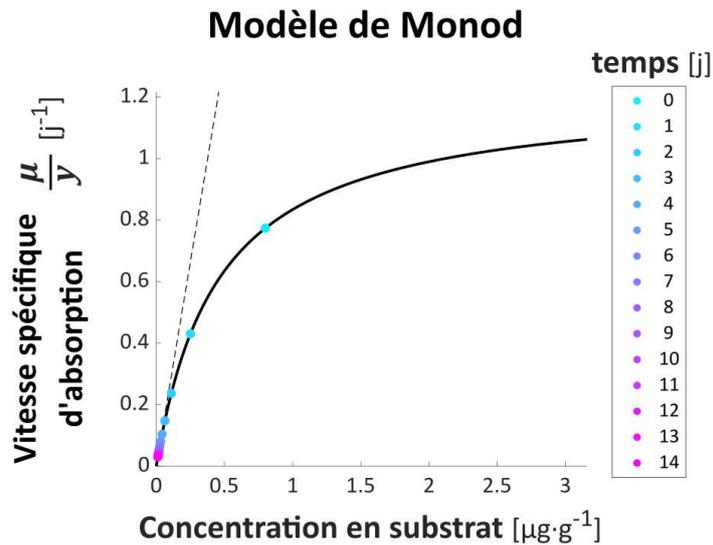


Figure II.17. Concentrations perçus en substrat et vitesse de croissance associée, dans l'expérience colocalisée hydrostatique. La relation de Monod du modèle calibré sur les expériences hydrostatiques (Babey et al., 2017) est représentée par la courbe noire (trait continu). Les concentrations en substrat présentes dans le cube initialement amendé en substrat sont représentées pour chaque jour par les points de couleur, en absence de dégradation bactérienne. La concentration diminue au fil du temps du fait de la diffusion hors du cube initial et de l'adsorption irréversible. Pendant la majeure partie de l'expérience, les concentrations dans le cube initial, qui sont également les concentrations maximales dans la colonne de sol, se situent dans le régime de Monod où est μ est quasi-proportionnel à S (courbe en pointillés).

Sur la base de ces considérations, l'hypothèse de la saturation a ainsi été invalidée. Par conséquent, une deuxième hypothèse a été émise, basée cette fois sur la différence de concentration initiale. L'hypothèse était que la différence de concentration initiale en substrat (voir **Tableau 1**), en faveur des expériences en percolation, pourrait induire une plus forte multiplication des bactéries et donc une meilleure minéralisation dans ces expériences. Cette hypothèse a été invalidée également. D'une part, les concentrations en substrat deviennent rapidement faibles du fait de la diffusion et de la lixiviation (**Figure II.18**). Cet effet est encore accentué car dès lors que les bactéries sont dispersées, elles se retrouvent exposées à des concentrations en substrat très faibles. D'autre part, on n'observe pas de minéralisation plus rapide dans l'expérience homogène en percolation que dans l'expérience homogène hydrostatique (voir section II.1).

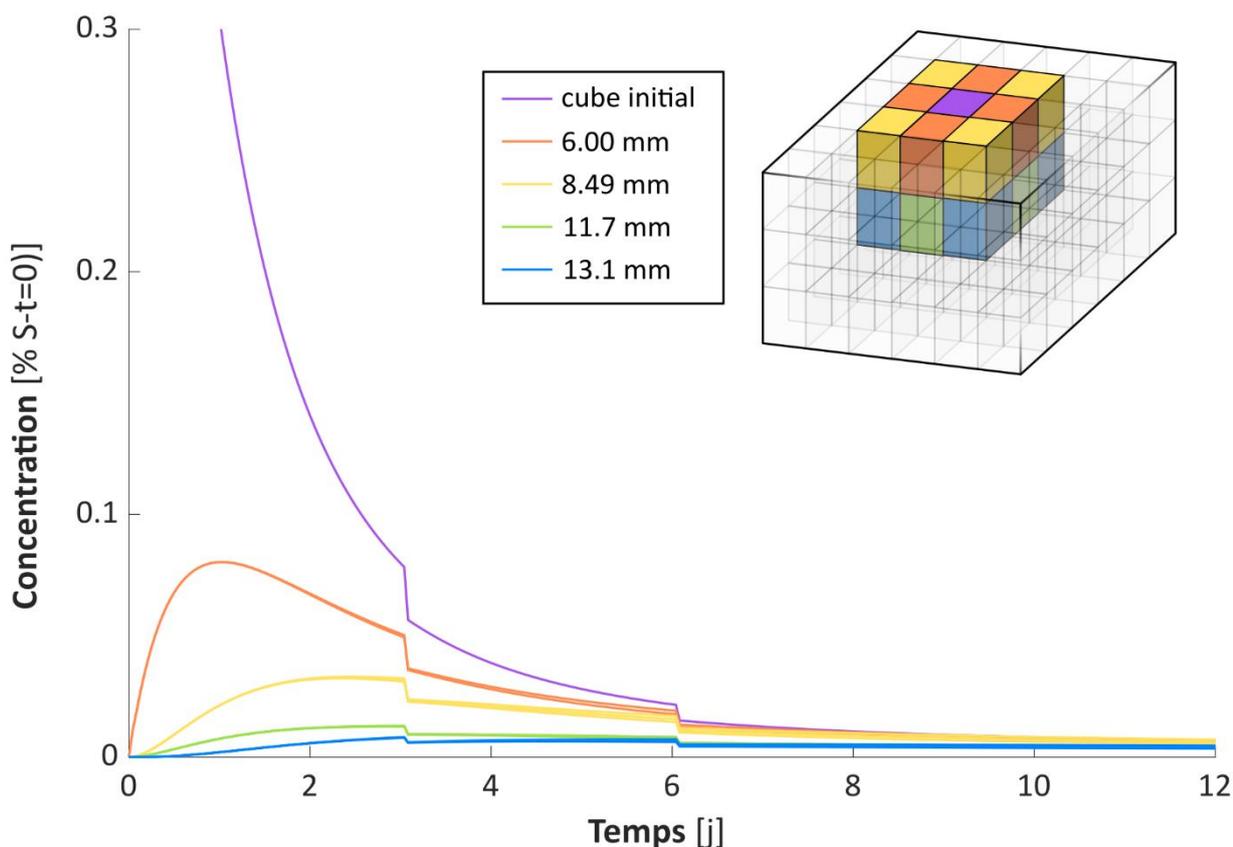


Figure II.18. Dynamique des concentrations en substrat, à différentes distances de la position initiale, pour l'expérience colocalisée avec percolation, en absence de dégradation bactérienne. Les concentrations sont représentées pour différents cubes représentés sur le schéma en haut à droite. La distance entre le centre de ces cubes et le centre du cube initial est indiquée en mm dans l'encadré. Les concentrations sont exprimées en % de la concentration initiale en substrat, le substrat étant amendé initialement uniquement dans le cube central (en violet).

Enfin, une dernière hypothèse a été considérée, issue du travail de Parker and Doxtader (1982) sur la dégradation du 2,4-D dans les sols en fonction de sa concentration initiale. Cette étude suggère la présence chez les communautés dégradant le 2,4-D de deux systèmes enzymatiques, inhibés à des concentrations différentes de 2,4-D. Cependant, l'écart de concentration initiale en 2,4-D entre les expériences hydrostatique et en percolation (de 1.8 à 14 $\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$, en masse de 2,4-D par masse de sol sec) n'est pas suffisamment important pour induire une différence au niveau des systèmes enzymatiques mobilisés.

En conclusion, ce n'est pas la différence de concentration initiale en substrat qui explique la différence de minéralisation.

II.4.2.2. Interaction entre dispersion et toxicité

Une dernière série de facteurs explicatifs hypothétiques a été formulée, reposant sur l'augmentation de la minéralisation due à la dispersion de composés toxiques loin des

bactéries. Pour être valide, il faut que ces composés toxiques soient présents en quantité suffisante pour induire un effet inhibiteur sur les bactéries, et que leur diffusion, si elle existe, soit peu significative au regard de leur dispersion hydrodynamique. Il est probable que ces composés toxiques, s'ils sont dispersés lors des épisodes de percolation, puissent être aussi lixiviés. Or la cinétique de minéralisation des expériences homogènes en condition de percolation n'est pas plus rapide qu'en condition hydrostatique. Cela suggère que l'effet bénéfique de la lixiviation est compensé par une autre différence entre les expériences hydrostatique et en percolation, qui ne peut être que la différence de concentration initiale en substrat. Ce raisonnement suggère que les composés toxiques dérivent de la consommation du substrat. Leur lixiviation compense leur concentration potentiellement plus grande due à la concentration initiale plus importante de substrat. La dispersion hydrodynamique dans l'expérience colocalisée en percolation permet alors de diluer ces composés toxiques, spécifiquement dans cette expérience. Trois processus inhibiteurs ont été identifiés : l'acidification du milieu (Dohi and Mougi, 2018) lors de la minéralisation du 2,4-D en CO₂, l'épuisement local de l'O₂ (Skopp et al., 1990) dû à la minéralisation, et la production de résidus non-extractibles (Kästner et al., 2014).

La limitation de la minéralisation par la teneur en O₂ est peu probable étant donné la saturation du milieu de 54% (Or et al., 2007; Hron et al., 2014). L'acidification du milieu peut être due à la production de CO₂, ainsi qu'à la production transitoire d'acide lors de la déchlorination du 2,4-D, mais ces deux effets sont ici négligeables étant donné la faible quantité initiale de 2,4-D (Greer et al., 1990). Enfin, la dégradation du 2,4-D s'accompagne d'une production de résidus non-extractibles. Ces résidus ont été mesurés dans les expériences et sont concentrés en direction du cube initial de sol, en corrélation avec l'abondance de gènes *tfdA* détectés, ce qui suggère que ces résidus sont majoritairement d'origine biogénique (Pinheiro et al., 2018). Néanmoins ces résidus ne sont pas soumis à la lixiviation, ce qui signifie que leur potentiel impact toxique aurait également dû être observé dans l'expérience homogène en percolation, ce qui n'est pas le cas. D'autre part, il est peu probable que les résidus biogéniques soient hautement toxiques pour les bactéries (Kästner et al., 2014), ce qui a permis d'éliminer ce facteur explicatif.

II.4.2.3. Amélioration de la dégradation du 2,4-D par la présence de débris cellulaires

Une dernière hypothèse a été explorée, liée à la différence de composition des différents cubes de sol des expériences. Dans les expériences, les cubes de sol stériles ont été obtenus par irradiation γ . Ce rayonnement électromagnétique altère l'ADN des organismes du sol, conduisant à la perte de leur capacité multiplicative et à leur mort cellulaire. La biomasse irradiée et les débris cellulaires qui en résultent restent néanmoins présents dans le sol lorsque celui-ci n'est pas lavé, ce qui était le cas ici, fournissant ainsi une source de matière organique et d'énergie potentiellement non négligeable. On peut faire l'hypothèse que la dispersion des bactéries dans l'expérience colocalisée avec percolation les déplace vers les cubes de sol irradiés, et donc riches en débris cellulaires. La présence de cette matière organique pourrait alors influencer le nombre ou l'activité des dégradeurs du 2,4-D.

Cette hypothèse a néanmoins été finalement écartée car les mesures de gènes *tfdA* montrent que la croissance de la population de dégradeurs principaux du 2,4-D, qui l'utilisent comme source de matière et d'énergie, est entièrement corrélée à la consommation du 2,4-D et non pas à la consommation d'un substrat annexe potentiel. De plus, dans le cas où la présence de débris cellulaires accentuerait l'activité cométabolique de certains microorganismes, des mesures de gènes codant pour l'ARNr 16S ont également été réalisées dans les expériences et montrent l'absence de multiplication de la population globale des microorganismes dans la colonne de sol.

Enfin, l'augmentation de la minéralisation due à la libération d'enzymes endocellulaires lors de l'irradiation est écartée, étant donné la faible minéralisation dans l'expérience colocalisée hydrostatique.

Tous ces éléments concordent à montrer que l'augmentation de la minéralisation dans l'expérience colocalisée avec percolation provient d'un couplage entre le métabolisme et la dispersion des bactéries. Afin de caractériser cette interaction, et de vérifier la possibilité ou non de reproduire les observations expérimentales, il est apparu nécessaire d'explorer de manière plus systématique cette interaction entre activité bactérienne et dispersion au moyen d'un criblage numérique.

Points clés

- ▶ Parmi tous les facteurs envisageables pour expliquer l'augmentation de la minéralisation avec la percolation dans les expériences colocalisées, la seule piste plausible est la combinaison entre, d'une part, la dispersion des bactéries rendue possible par la percolation et, d'autre part, certains traits biologiques précis qui permettent à cette dispersion d'avoir un impact positif sur l'activité des bactéries. ▶ En d'autres termes, l'écart de minéralisation entre les expériences avec et sans percolation provient d'un impact couplé des traits bactériens et de la dispersion.
- ▶ Etant donné la difficulté précédente à reproduire les données, malgré l'exploration de nombreux jeux de paramètres, il apparaît nécessaire de mettre en place une exploration systématique et la plus exhaustive possible des combinaisons de traits bactériens et de dispersion.

II.5. Mise en place du code MATLAB et résolution des problèmes

Afin d'étudier les interactions entre les processus biologiques et les processus de transport, une série d'expériences numériques a été mise en place, permettant de cribler de manière systématique l'espace des paramètres et les différents modèles. Le détail du criblage est donné en section III.1.2-2.4.

II.5.1. Choix d'un modèle de transport simplifié

Afin de faciliter la mise en place du criblage et la comparaison des expériences numériques entre elles, et en raison des incertitudes pour caractériser précisément le transport dans la colonne de sol (voir sections II.2.1 et II.2.2), les processus de transport ont été simplifiés, notamment dans leur composante verticale, de manière à pouvoir découpler la lixiviation et la dispersion. La dispersion du substrat et des bactéries causée par la percolation (dispersion hydrodynamique) a ainsi été modélisée par un processus diffusif ponctuel dans le temps, sur la base du processus déjà implémenté pour la diffusion du substrat. À noter qu'il a été tenu compte de la correspondance de la vitesse d'absorption μ/y aux bactéries transportées. En effet, en raison du délai d'accommodation, l'activité bactérienne à un instant donné ne dépend pas uniquement de l'exposition des bactéries au substrat à cet instant, mais également de leur historique d'exposition. La vitesse d'absorption des bactéries occupant une position donnée varie ainsi suivant leur provenance. Comme discuté dans la section II.3, il est raisonnable de penser que la compréhension des données expérimentales ne repose pas en premier lieu sur la complexité du modèle de transport. Il est à noter cependant que, au vu des résultats de la section II.3.1, il sera nécessaire de modéliser les répartitions initiales disjointes à part. Le criblage a donc été adapté spécifiquement aux traitements homogènes et colocalisés. Tous les détails sur le modèle de transport sont explicités dans la section III.1.2-2.3. Les postulats sur le modèle de transport sont également détaillés et validés au cours de la section III.

II.5.2. Nécessité d'adapter la résolution numérique des équations de bioréaction

Les résultats obtenus à partir de ce criblage, et présentés dans la section III.1.2, ont soulevé l'intérêt d'intégrer un deuxième type de modèle dans le criblage, en plus du modèle de Monod. Le rôle majeur de l'efficacité maximale d'absorption et de la densité en bactéries ont en effet orienté vers l'exploration du modèle ratio-dépendant de Contois (Contois, 1959). Ce modèle est présenté et discuté en détails dans la section III suivante, mais comme son implémentation au sein du criblage a nécessité certains développements, il est présenté succinctement ici. À la différence du modèle de Monod (Éq 2), la vitesse spécifique de croissance μ du modèle de Contois dépend non pas de la concentration en substrat S mais du ratio entre cette concentration et la densité en bactéries B , s'écrivant ainsi :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S/B}{\kappa_C + S/B} = \mu_{max} \frac{S}{B \kappa_C + S} \quad \text{Éq 12}$$

Comme cela est détaillé dans la section III suivante, l'espace des paramètres à cribler a été choisi le plus exhaustif possible afin d'explorer toute la gamme de scénarii physiquement envisageables. Cette grande variabilité des paramètres criblés a nécessité de s'assurer de la polyvalence de la méthode de résolution numérique du modèle, c'est-à-dire : sa capacité à résoudre à la fois des systèmes à très faible ou à très forte minéralisation, spatialement très hétérogènes ou complètement homogènes, reposant sur une croissance très rapide ou très lente ou ratio-dépendante des bactéries, sans effet de latence ou au contraire avec un délai d'accommodation dépassant la durée des expériences, et pouvant faire intervenir des dispersions abruptes du substrat et des bactéries.

Le système complet d'équations différentielles du modèle de transport bioréactif est présenté dans la section III.1.2. La résolution des équations de transport et de bioréaction a été faite selon une méthode séquentielle non-itérative de fractionnement d'opérateur (*sequential non-iterative operator-splitting method*), c'est-à-dire suivant une séquence d'une étape de transport suivie d'une étape de bioréaction, pour chaque pas de temps (Carrayrou et al., 2004; Lagneau and van der Lee, 2010). La résolution numérique du système d'équations a été résolue sur MATLAB avec les solveurs implémentés nativement. La prise en compte de valeurs « extrêmes » de paramètres, de la croissance ratio-dépendante de type Contois, et des dispersions de bactéries et du substrat, a soulevé trois problèmes principaux lors de la résolution numérique des équations : au niveau de la conservation de la matière, au niveau de la saturation de la mémoire vive, et au niveau du temps de calcul. Ces problèmes ont été résolus en adaptant le choix du solveur, les tolérances, et la linéarisation de l'équation de la vitesse de croissance μ , ainsi qu'en instaurant un seuil pour contourner la résolution de certaines situations négligeables mais insolubles.

II.5.3. Seuil de concentration en substrat pour contraindre la vitesse spécifique de croissance

Les principaux problèmes ont été la durée excessive des simulations (**Figure II.19**) et l'incohérence du bilan de masse du système qui sont apparus lorsque la consommation du substrat était très importante malgré une concentration en substrat très faible. Cette situation est causée d'une part par les faibles vitesses d'accommodation α simulées, qui induisent un décalage temporel de plusieurs dizaines de jours entre la concentration perçue en substrat et la vitesse spécifique d'absorption μ/y , et d'autre part par la dispersion, qui peut déplacer les bactéries depuis des zones très riches en substrat vers des zones très pauvres. Ce déséquilibre entre faible concentration en substrat et forte vitesse de consommation dans un cube de sol est amplifié par les fortes concentrations initiales en bactéries et efficacités maximales d'absorption, et peut rendre impossible en pratique la

résolution de certaines simulations. En effet, lorsque la concentration en substrat devient très faible mais que la dégradation demeure rapide, et du fait de l'interdiction pour les concentrations d'être négatives, la vitesse de réaction dS/dt se retrouve contrainte d'être nulle. Cela conduit le système d'équations différentielles ordinaires à tendre vers un système d'équations différentielles algébriques qui est alors sous-déterminé, c'est-à-dire qu'il n'y a plus d'unicité de la solution, plus précisément concernant $\mu(t)$. Le comportement du système lorsque la concentration en substrat tend vers zéro ne joue pas un rôle significatif dans les dynamiques des grandeurs auxquelles on s'intéresse (dynamique de minéralisation, densités bactériennes, etc.). En revanche, l'apparition d'un système d'équation sous-déterminé fausse le fonctionnement du solveur MATLAB, conduisant aux problèmes mentionnés précédemment.

Cet « effet de bord » est une difficulté habituelle dans la modélisation de réactions chimiques. Il n'existe pas de solution élégante et simple, mais une méthode de résolution courante consiste à définir un seuil en dessous duquel certaines contraintes sont ajoutées pour imposer l'unicité de la solution. Dans notre cas, en dessous d'une certaine concentration en substrat, μ est imposé. Etant donné que la concentration initiale en substrat est un paramètre fixé dans le criblage et similaire entre les expériences hydrostatique et en percolation, le seuil a été fixé en absolu, à $1.67 \cdot 10^{-6} \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (masse de carbone du substrat par masse de sol sec). En dessous de cette concentration, la vitesse d'absorption μ/y est imposée à sa valeur sans accommodation. Ce seuil a été choisi comme le plus petit seuil permettant la résolution de notre système d'équations par le solveur de MATLAB. Dans un second temps, la concentration seuil a été remplacée par un seuil relatif à la concentration initiale en substrat, notamment pour l'exploration de différentes concentrations initiales en substrat (section IV.4).

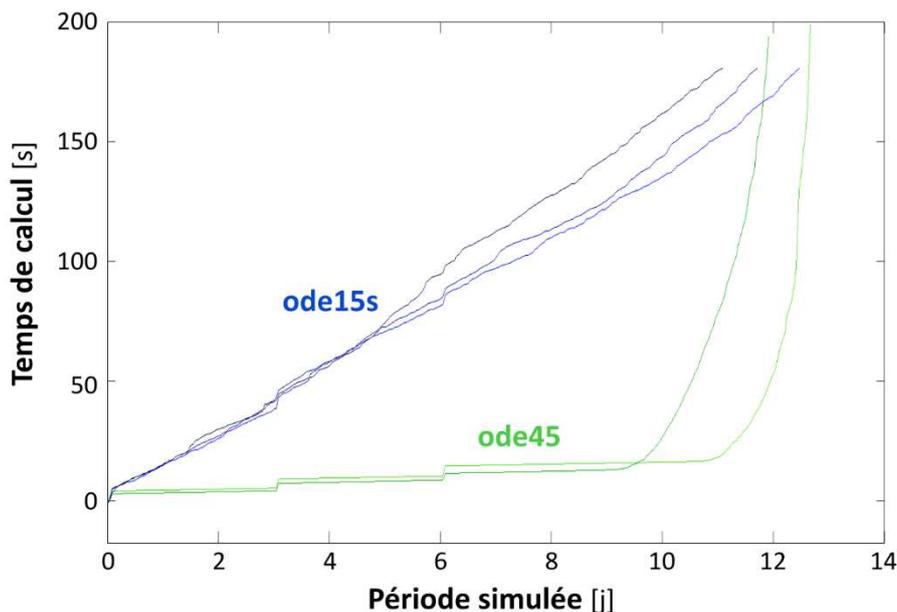


Figure II.19. Exemple de croissance exponentielle du temps de calcul, et différence de comportement selon le solveur MATLAB. Les courbes représentent la durée de simulation

nécessaire pour obtenir les résultats sur les 14 premiers jours d'expérience, pour l'expérience colocalisée en percolation avec différents degrés de dispersion. L'objectif est d'obtenir les résultats sur 24 jours. Les courbes vertes correspondent au solveur *ode45*, et les courbes bleues au solveur *ode15s* (voir détails section II.5.5).

II.5.4. Linéarisation du système d'équations différentielles

La dynamique des concentrations en substrat dS/dt et en bactéries dB/dt (Éq 4) dues à la croissance et à la dégradation dépend à la fois de la densité en bactéries B et de la vitesse de croissance μ , qui dépend elle-même de la concentration en substrat S . Sans linéarisation, la résolution de ce système d'équations différentielles est très lente, ce qui est incompatible avec le criblage d'un grand nombre de jeux de paramètres, et peut également mener à une saturation de la mémoire vive (*RAM*). Pour éviter cela, le système d'équations différentielles a été linéarisé pour que les dynamiques dS/dt et dB/dt ne dépendent plus que d'une seule variable. La linéarisation initiale et la linéarisation utilisée dans ce travail sont étés toutes deux introduites par Tristan Babey.

La linéarisation initiale consistait à linéariser la vitesse de croissance μ . Cela conduisait aux expressions suivantes dans lesquelles le terme en orange est calculé au début de chaque itération de temps et est considéré comme constant lors de la résolution du système d'équations différentielles pendant cette itération :

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{\mu}{y}B \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= \mu B \\ \mu B &= \mu_{max} \frac{S}{S + \kappa_M} B\end{aligned}\tag{Éq 13}$$

avec μ_{max} la vitesse spécifique maximale de croissance et κ_M la constante de saturation de Monod. À noter que, par soucis de simplicité, cette expression ne tient pas compte du délai d'accommodation des bactéries α .

Néanmoins, cette linéarisation s'est avérée inefficace lorsqu'elle était appliquée au modèle de Contois (Contois, 1959), dans lequel la vitesse de croissance μ s'exprime de la manière suivante :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{S + B \kappa_C}\tag{Éq 14}$$

avec κ_C la constante de saturation de Contois. Afin de résoudre les problèmes de temps de calcul et de conservation de la masse, à la fois avec le modèle de Monod et de Contois, il a été nécessaire d'utiliser la linéarisation suivante :

$$\mu_B = \frac{\mu}{S} B \times S = \mu_{max} \frac{S}{S + \kappa_M} B \quad \text{Éq 15}$$

Ce changement de linéarisation impacte la dynamique finale de minéralisation, mais pas de manière significative.

II.5.5. Résolution numérique par MATLAB et temps de calcul

Pour résoudre le système d'équations différentielles, le solveur MATLAB *ode45*, basé sur la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (Shampine and Reichelt, 1997), s'est avéré être le choix le plus avantageux. Avec ce solveur, le pas de temps d'intégration est déterminé par MATLAB en fonction de l'équation qui nécessite le plus petit pas de temps pour respecter les conditions d'exactitude. Ces conditions ont été imposées par une tolérance absolue fixée à 0.1‰ de la concentration initiale en substrat, représentant le meilleur compromis entre exactitude et vitesse de résolution. Le pas d'itération, pendant lequel le terme en orange de l'Éq 15 était constant, a été imposé à 1 h, suivant les mêmes objectifs.

La résolution des 62 426 simulations correspondant au criblage de l'ensemble de combinaisons de paramètres et de modèles a nécessité environ deux semaines sans parallélisation, contre deux jours avec une parallélisation par 12 (avec la fonction *parfor* de MATLAB), sur serveur avec 2.2 GHz, 512 Go RAM.

Points clés

- ▶ La mise en place du criblage d'expériences numériques a nécessité l'adaptation de la résolution numérique du modèle, afin qu'il puisse couvrir toute l'étendue des situations à tester.
- ▶ En adaptant la résolution du système d'équations différentielles du modèle bioréactif, et sans faire encore d'optimisation des scripts, la réalisation du criblage nécessite un temps de calcul raisonnable, de l'ordre de quelques jours.

Résumé du chapitre II

Le cheminement décrit dans cette section a permis, via l'analyse des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) et l'exploration des scénarii possibles, de mettre en évidence le caractère contre-intuitif de l'augmentation de la minéralisation due à la dispersion. Les expériences de Pinheiro et al. (2018) se démarquent des autres études réalisées sur le rôle des répartitions

de bactéries du fait des conditions de répartition du substrat qui sont hétérogènes. Cette hétérogénéité de répartition du substrat introduit un contexte qui a tendance à défavoriser la dispersion des bactéries loin de l'origine du substrat. Ce contexte permet ici de faire ressortir l'originalité de l'impact positif de la dispersion sur la minéralisation. Il apparaît que l'impact de la dispersion est variable et dépend des traits biologiques qui décrivent l'absorption de substrat par les bactéries.

Cette section présente le travail et les réflexions qui ont précédé l'obtention et l'interprétation des résultats de l'article présenté dans la section suivante. Elle a été alimentée par de nombreuses discussions, conférences et présentations. Elle est qualifiée de « préliminaire » car elle représente le cheminement exploratoire qui a été nécessaire pour aboutir à la démarcation de la problématique centrale de cette thèse et de l'article ci-après. Elle représente néanmoins une partie conséquente de cette thèse.

Les sols abritent des communautés vivantes qui dépassent nos capacités de perception [...] par leur incroyable foisonnement : dans un gramme de sol, on peut distinguer entre 100 000 et un million d'espèces de bactéries... Rien dans notre environnement quotidien, si ce n'est un ciel étoilé, ne nous prépare à une pareille abondance et une telle diversité.

— Atlas français des bactéries du sol

Le microbe n'est rien, le terrain est tout.

— Antoine Béchamp,
Claude Bernard, Louis
Pasteur

III Contributions

Ce chapitre présente la publication principale issue de cette thèse. La première section contient le manuscrit soumis à publication ainsi que le Matériel supplémentaire, complétés par des résultats supplémentaires donnant des clés de compréhension et d'analyse. La deuxième section approfondit la discussion sur l'originalité des résultats. Les deux dernières sections fournissent des résultats complémentaires, respectivement sur le modèle de transport et sur le modèle ratio-dépendant.

III.1. Contribution principale : « *Competition within low-density bacterial populations as an unexpected factor regulating carbon decomposition in bulk soil* »

III.1.1. Présentation de l'article

La dégradation du carbone organique du sol repose principalement sur l'activité des microorganismes du sol, qui sont de fait au cœur de nombreuses problématiques actuelles (voir section I.1). La décomposition bactérienne du carbone organique du sol est généralement décrite comme étant contrôlée en premier lieu par l'accès des bactéries au carbone (voir section I.2). L'influence des traits biologiques bactériens sur le rôle joué par l'accessibilité a rarement été étudiée jusqu'à présent. Les résultats de deux séries d'expériences sur la décomposition d'un pesticide dans des sols reconstitués (Babey et al. (2017); Pinheiro et al. (2015, 2018), voir section II.1) indiquent que la simple caractérisation des phénomènes spatiaux n'est pas suffisante (voir sections 0 et 0), révélant le rôle additionnel des traits bactériens (voir section II.4). La modélisation se prête particulièrement bien à l'étude de cet aspect (voir section I.2.3). Dans le manuscrit ci-après, soumis à *Soil Biology and Biochemistry* pour publication [[article SBB](#)], un modèle de transport bioréactif est ainsi développé sur la base du modèle de Babey et al. (2017) et des travaux préparatoires

de la section II pour permettre de cribler les impacts couplés de la dispersion et des traits bactériens sur la minéralisation. Les résultats du modèle sont comparés aux résultats des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) dans lesquelles la minéralisation du pesticide 2,4-D était mesurée en conditions contrôlées de répartitions spatiales initiales et de transport. La dispersion des bactéries loin de la localisation initiale du substrat induit une augmentation importante de la minéralisation du 2,4-D, révélant l'existence d'une régulation de la minéralisation par la densité de population bactérienne, s'opposant à la régulation par la dilution du substrat. La régulation de la minéralisation par la densité est dominante pour les bactéries avec une forte efficacité maximale d'absorption du substrat, qui peuvent être qualifiées d'oligotrophes. Les résultats du modèle suggèrent que la distance entre les bactéries oligotrophes est un régulateur plus fort de la dégradation que la distance entre les bactéries et l'origine du substrat. De tels oligotrophes, courants dans les sols, sont en compétition entre eux pour le substrat même aux faibles densités de populations modélisées. Au-delà d'une certaine densité bactérienne, qui peut être faible si les bactéries sont efficaces, le flux massique de substrat qui diffuse en direction des bactéries est trop faible par rapport au flux massique consommé par ces dernières, induisant une déplétion en substrat et une limitation de la dégradation par le flux massique diffusif. Le modèle de croissance ratio-dépendante de Contois, qui inclut l'effet de la densité bactérienne dans l'expression de l'efficacité maximale d'absorption, offre un outil plus polyvalent pour prédire la minéralisation par des bactéries oligotrophes. L'étude du couplage entre les phénomènes spatiaux et les processus bactériens donne un nouvel éclairage sur la compréhension de l'accessibilité entre les bactéries et les substrats organiques dissouts, régulée à la fois par la dilution du substrat et par la densité de la population bactérienne.

III.1.2. Manuscrit (Préprint)

Competition within low-density bacterial populations as an unexpected factor regulating carbon decomposition in bulk soil

Alexandre Coche^{a*}, Tristan Babey^b, Alain Rapaport^c, Laure Vieublé Gonod^d, Patricia Garnier^d, Naoise Nunan^{e,f}, Jean-Raynald de Dreuzy^a

^a Univ Rennes, CNRS, Géosciences Rennes - UMR 6118, F-35000 Rennes, France

^b Stanford University, Department of Earth System Science, Stanford, USA

^c MISTEA, Univ. Montpellier, INRAE, Montpellier SupAgro, France

^d UMR Ecosys, INRAE, AgroParisTech, Université Paris-Saclay, 78850, Thiverval Grignon, France

^e Sorbonne Université, CNRS, IRD, INRAE, P7, UPEC, Institute of Ecology and Environmental Sciences—Paris, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France

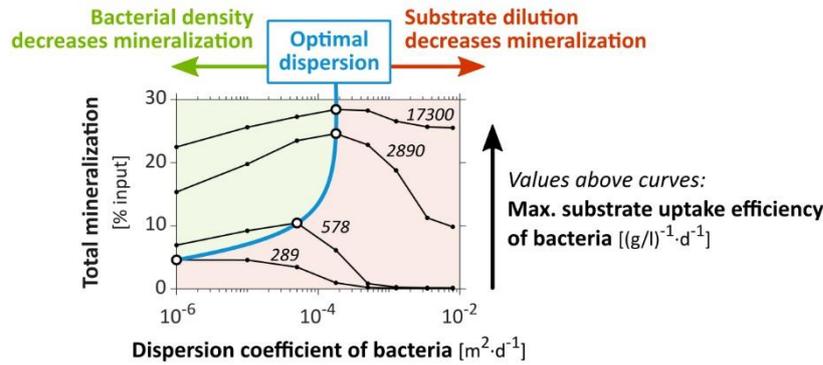
^f Department of Soil & Environment, Swedish University of Agricultural Sciences, P.O. Box 7014, 75007 Uppsala, Sweden

* Corresponding author. *E-mail address*: alexandre.co@hotmail.fr (A. Coche)

Abstract

Bacterial decomposition of organic matter in soils is generally believed to be mainly controlled by the access bacteria have to their substrate. The influence of bacterial traits on this control has, however, received little attention. Here, we develop a bioreactive transport model to screen the interactive impacts of dispersion and bacterial traits on mineralization. We compare the model results with two sets of previously performed cm-scale soil-core experiments in which the mineralization of the pesticide 2,4-D was measured under well-controlled initial distributions and transport conditions. Bacterial dispersion away from the initial substrate location induced a significant increase in 2,4-D mineralization, revealing the existence of a regulation of mineralization by the bacterial decomposer density, in addition to the dilution of substrate. This regulation of degradation by density becomes dominant for bacteria with an efficient uptake of substrate at low substrate concentrations (a common feature of oligotrophs). The model output suggests that the distance between bacteria adapted to oligotrophic environments is a stronger regulator of degradation than the distance between these bacteria and the substrate initial location. Such oligotrophs, commonly found in soils, compete with each other for substrate even at remarkably low population densities. The ratio-dependent Contois growth model, which includes a density regulation in the expression of the uptake efficiency, provide a more versatile representation than the substrate-dependent Monod model in these conditions. In view of their strong interactions, bioreactive and transport processes cannot be handled independently but should be integrated, in particular when reactive processes of interest are carried out by oligotrophs.

Keywords: biodegradation of organic matter; heterogeneous spatial distributions; bioreactive transport model; competition for substrate; bacterial traits; ratio-dependent growth



Highlights

- The impact of spatial distributions on decomposition depends on bacterial traits
- Decomposition can be reduced by competition between bacteria even at low densities
- Bacterial density regulation counterbalances substrate accessibility regulation
- Regulation of decomposition by bacterial density is more acute for oligotrophs

1. Introduction

Organic carbon is involved in most ecological functions provided by soils (Bünemann et al., 2018). Its cycling in soil depends upon the activity of microorganisms. Soluble organic molecules are taken up as substrates by specific populations of soil bacteria, and degraded inside the cells by endoenzymes to provide carbon and energy. This is precisely the case for the 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) used in this study as a generic model compound (Don and Weightman, 1985; Pieper et al., 1988; Boivin et al., 2005). Bacterial degradation of soil carbon has generally been modeled with the Monod equation, where the specific substrate uptake rate is controlled by substrate concentration and bacterial traits such as the maximum specific growth rate, the yield (or carbon use efficiency) and the "maximum uptake efficiency" (e.g. Monod, 1949; Sinton et al., 1986; Cheyins et al., 2010). With the Monod equation, at the lowest substrate concentration, the specific uptake rate is linearly proportional to the substrate concentration. The proportionality factor is referred to here as the "maximum uptake efficiency" and it reflects the maximal ability of the cell to capture substrate molecules that collide with its membrane (Button, 1978, 1983). The maximum uptake efficiency can also be understood as the volume from which a cell can harvest substrate per unit of time, as used in some studies (Desmond-Le Quéméner and Bouchez, 2014; Nunan et al., 2020; Ugalde-Salas et al., 2020). Each bacterium is assumed to be exposed to the whole substrate concentration of its surroundings, without any limitation by the population density (Lobry and Harmand, 2006).

The direct contact (exposure) between bacteria and substrate depends on their spatial distributions (Holden and Firestone, 1997a; Nunan et al., 2007). Bacteria and substrate are both heterogeneously distributed as a result of numerous biotic and abiotic processes (Dechesne et al., 2014; Kuzyakov and

Blagodatskaya, 2015). There are complex feedback loops between these distributions, dispersive transport processes such as diffusion and hydrodynamic dispersion (Madsen and Alexander, 1982; Breitenbeck et al., 1988), and the bacterial activity itself such as consumption and growth (Poll et al., 2006).

Aggregated bacterial distributions, as observed at mm-scale for 2,4-D degraders (Vieublé Gonod et al., 2003), have been shown to decrease degradation rates when the distribution of substrate is homogeneous (Pallud et al., 2004; Dechesne et al., 2010). Yet, the role of bacterial metabolic traits on the impact of bacterial and substrate distributions on degradation remains mostly unknown, especially when substrate and bacteria are heterogeneously and dynamically redistributed in soils over μm -to-cm scales by numerous spatial disturbances (Madsen and Alexander, 1982; Breitenbeck et al., 1988; König et al., 2020). We investigated the extent to which bacterial activity and transport processes can be treated independently or should be integrated to characterize, understand and predict degradation under various advective, diffusive and dispersive conditions. The simultaneous characterization of the impacts of bacterial traits and transport parameters through their mutual interactions is methodologically challenging. It requires several well-controlled experiments in comparable degradation conditions, with specific spatial distributions of substrate and degraders in specific transport conditions, and a spatiotemporal monitoring of the different carbon pools.

Among the scarce relevant datasets (e.g. Dechesne et al., 2010), we used the two sets of cm-scale soil-core experiments performed by Pinheiro et al. (2015, 2018), in which the degradation of 2,4-D under different initial spatial distributions and transport conditions was measured in similar repacked soil columns. Mostly reported independently, they have shown first that the proximity between bacteria and the initial location of a heterogeneously distributed substrate exerts a strong control on mineralization. Mineralization was greater when bacteria were close to the initial location of substrate, even though most of the initial soluble substrate diffused away from its initial location. This was attributed to the fact that bacteria located far from the initial substrate location were only exposed to highly diluted substrate concentrations (Babey et al., 2017). However, the hydrodynamic dispersion of both bacteria and substrate away from their initial location caused a greater than four-fold increase in the mineralization of substrate that was not leached out, to the point that it almost reached the same performance as in homogeneous conditions in which there was no dilution (Pinheiro et al., 2018). The surprising increase in mineralization suggests a regulation of mineralization by population density compensating the effect of substrate dilution, the activity of bacteria being enhanced when their density is diluted by the dispersive percolation events. While such regulations by bacterial density have not yet been considered in soils, presumably because of the extremely low apparent bacterial densities found in soils (Young et al., 2008), they are well known in bioreactors, where they are usually modeled by the ratio-dependent Contois growth law (Contois, 1959; Harmand and Godon, 2007).

In order to determine the relevance of the putative bacterial decomposer density effect on decomposition, we developed a quantitative approach to model the two sets of experiments within the same unified framework (section 2). We assessed the relevance of previously developed models, improved the calibration of a Monod-based model and investigated an alternative Contois-based model (section 3). We discuss the implication of the results on the controlling factors of soil organic

carbon cycling, on the relevant bacterial growth models and on the possible bacterial strategies (section 4).

2. Models and methods

2.1. Experiment scheme, geometry and initial distributions

We briefly introduce the experiments performed previously and highlight aspects of the experiments that are important for the modeling (**Fig. 1**). The full experimental setting is presented in the supplementary materials (**Fig. S1** and **Table S1**) for the sake of completeness. Soil columns were packed with two homogeneous or heterogeneous arrangements of soil cubes, either sterilized, or hosting the indigenous microbial communities (referred to as “degraders”) and amended with ^{14}C -labelled 2,4-D (referred to as “substrate”). Two sets of experiments, referred to as “hydrostatic” and “percolation” conditions, were performed respectively with only substrate diffusion (Pinheiro et al., 2015), or with additional substrate and bacterial advection and dispersion caused by water percolation (Pinheiro et al., 2018). The initial locations of the bacteria and substrate were set in the model according to the experimental conditions (**Fig 1A**). Initial concentrations used in the model are detailed in **Table 1**. In the experiments, the mass of mineralized ^{14}C derived from the degradation of the labelled 2,4-D was monitored at the core scale during at least two weeks (**Fig. 1B**). These data were used to confront the model processes with a physical system, as detailed in section 2.5.

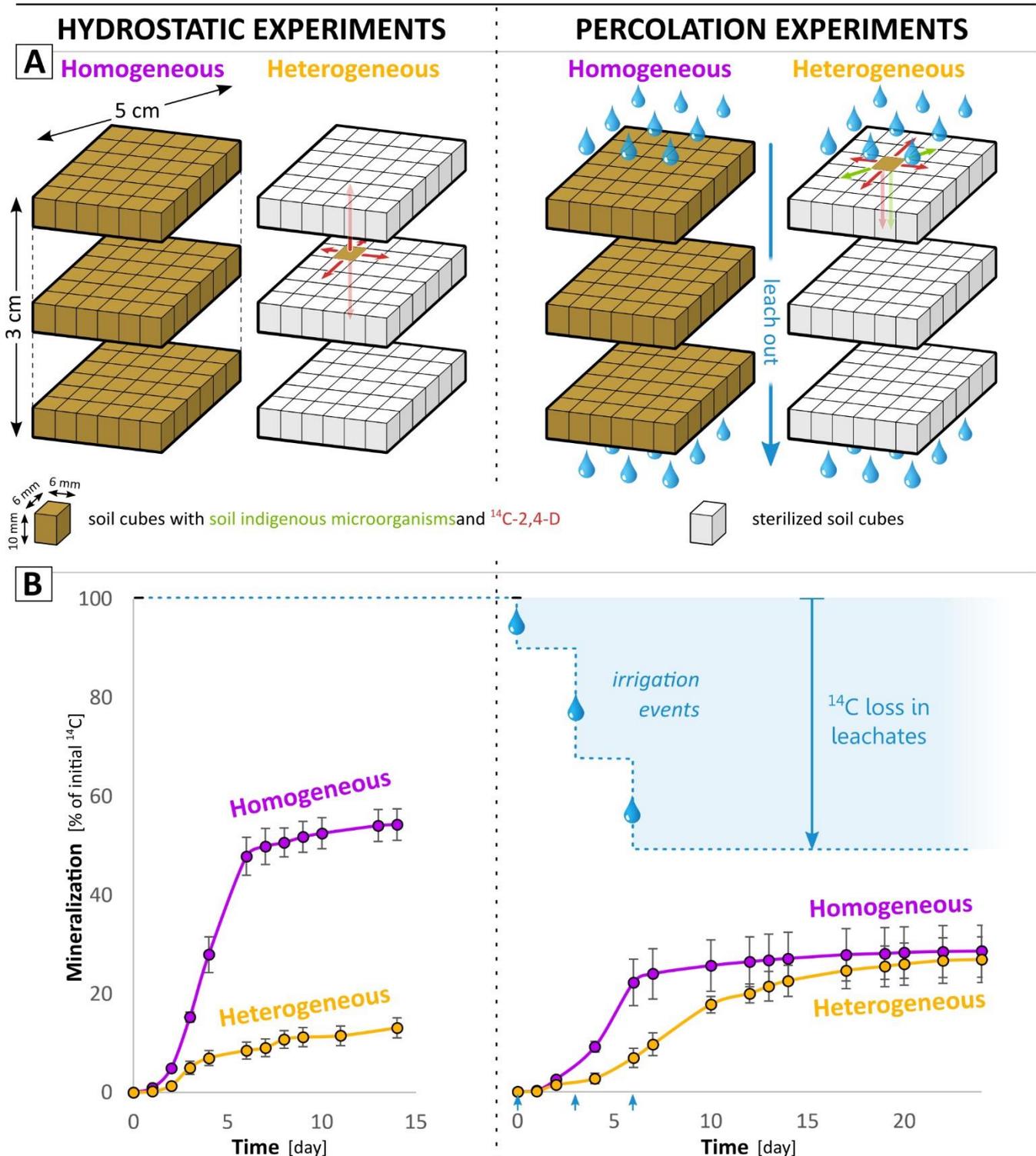


Fig. 1. Model experimental design, geometry and initial distributions (A) based on previously performed experiments in hydrostatic (Pinheiro et al., 2015) and percolation (Pinheiro et al., 2018) conditions. The red and green arrows refer respectively to the 2,4-D and degrader modeled displacements. (B) Experimental cumulated production of CO_2 (adapted from Pinheiro et al. (2018, 2015), permission for reproduction granted by Elsevier).

2.2. Bioreactive model

The bioreactive model extends the model published by Babey et al. (2017) (**Fig. 2**) to account for Contois growth law as an alternative to Monod's. The sorption processes, the bacterial lag phase and the nutrient recycling described below were previously discussed and their use justified in Babey et al. (2017) to consistently represent the experimental data. The $r(\cdot)$ notation expresses the reaction rates of the biochemical dynamics that are expressed as follows:

$$r(S) = k_{AS} A - k_{SA} S - k_R S - \frac{\mu}{y} B + m_t \chi B \quad (1)$$

$$r(A) = k_{SA} S - k_{AS} A \quad (2)$$

$$r(R_S) = k_R S \quad (3)$$

$$r(CO_2) = \frac{(1-y)}{y} \mu B \quad (4)$$

$$r(B) = \mu B - m_t B \quad (5)$$

$$r(R_B) = m_t(1 - \chi)B \quad (6)$$

All variable and parameter definitions are listed in **Table 1**. The dynamics of the specific growth rate μ are given, for the Monod-based model, by:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = \alpha \left(\mu_{max} \frac{S}{\kappa_M + S} - \mu \right) \quad (7)$$

and, for the Contois-based model, by:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = \alpha \left(\mu_{max} \frac{S/B}{\kappa_C + S/B} - \mu \right) = \alpha \left(\mu_{max} \frac{S}{\kappa_C B + S} - \mu \right) \quad (8)$$

where $\mu = 0$ at $t = 0$.

The soluble substrate S is either reversibly adsorbed to soil particles (pool A) or irreversibly adsorbed (pool R_S) (Eqs. (1), (2), (3)), or taken up by bacteria B (Eq. (1)) and metabolized into CO_2 (Eq. (4)) and new biomass B (Eq. (5)). k_{SA} and k_{AS} are the reversible sorption coefficients. k_R is the irreversible one. Bacteria death occurs at a constant rate m_t (Eq. (5)) and a fraction of the bacterial necromass is considered to return to the soluble substrate pool S to account for nutrient recycling (Eq. (1)), while the rest is transformed to biotic residues R_B (Eq. (6)). The nutrient recycling is necessary to adequately predict the late dynamics of mineralization. Its impact on mineralization is only marginal during the first five days. The adsorbed substrate and biotic residues form the pool of insoluble carbon $A + R_S + R_B$. The substrate S is consumed by bacteria B according to their specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu$ expressed either by the substrate-dependent Monod growth law (Eq. (7)) (Monod, 1949) or by the ratio-dependent Contois growth law (Eq. (8)) (Contois, 1959). y is the yield coefficient and relates the specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu$ to the specific growth rate μ . μ_{max} is the maximum specific growth rate. κ_M and κ_C are Monod and Contois constants respectively. The effective uptake is delayed by the accommodation rate α , which explicitly takes into account the "memory" effects of the bacteria when adapting to new conditions (Patarinska et al., 2000). This delay is necessary to capture the

mineralization lag time at the beginning of the experiments (see **Fig. S6**). Over long time periods ($t \gg 1/\alpha$), μ follows the exact expression of the Monod or Contois equations. All modeled pools (S , B , CO_2 , A , R_S and R_B) were expressed as carbon concentrations in $\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (mass of carbon per mass of dry soil) considering a soil water content of $0.205\text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$ (mass of water per mass of dry soil), a bulk density of the soil column of $1.3 \cdot 10^3\text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ (mass of dry soil per apparent soil volume) and an average bacterial dry weight of $2.8 \cdot 10^{-13}\text{ g}$ corresponding to $1.49 \cdot 10^{-13}\text{ g}$ of carbon per cell. These values of water content and bulk density were those set up in the experiments, the latter corresponding to a water potential adjusted at -31.6 kPa (pF 2.5). The average bacterial weight was assumed based on Dechesne et al. (2010) and Pinheiro et al. (2015). The water-filled pore space (54%, volume of water per volume of pores) was such that oxygen was not considered a limiting factor for 2,4-D degradation.

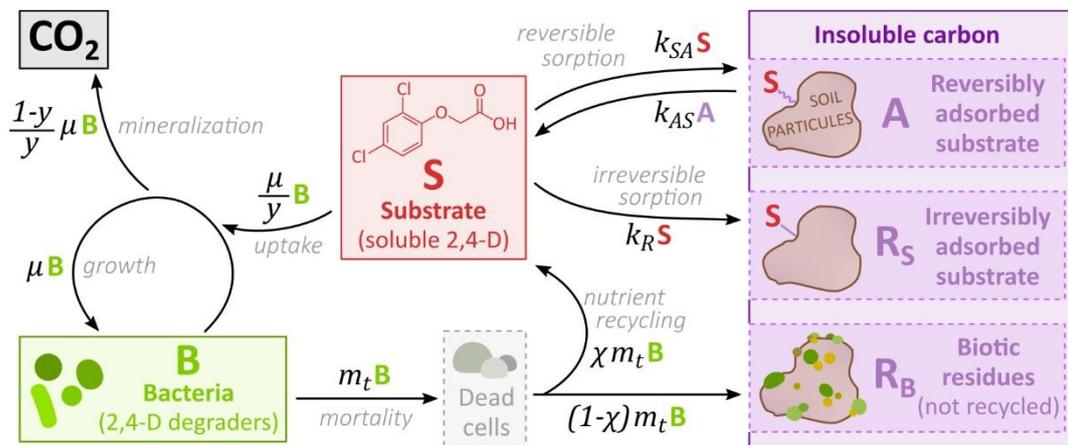


Fig. 2. Graphical representation of the biochemical model and carbon fluxes identified by the arrows. Under low substrate concentrations S , the specific uptake rate $(1/y)\cdot\mu$ becomes equal to $S\cdot(1/y)\cdot\mu_{max}/K_M$, where $(1/y)\cdot\mu_{max}/K_M$ is referred to as the “maximum uptake efficiency”.

2.3. Reactive transport model

The transport model is based on the diffusion model of Babey et al. (2017) to which advective-dispersive processes explored in the experiments of Pinheiro et al. (2018) are added. Bacterial leaching out and dispersion were observed only in the percolation experiments while the substrate was also reported to diffuse. Hydrodynamic leaching and dispersion were modeled independently, as they result from, respectively, bypass flow through large pores and complex hydrodynamic dispersion processes coming not only from usual flow mechanisms but also from large saturation variations and local redistribution of moisture in the pore network. Due to the lack of adequate experimental data to characterize the details of the dispersion process, we applied a simple isotropic dispersion coefficient. Complementary numerical simulations show that other anisotropic dispersion parameterization are only weakly sensitive (**Fig. S3**). Bacterial and substrate transports were described with the same advective and dispersive parameters. This assumption did not significantly alter the results (**Fig. S4**). Coupled to the equations of the bioreactive model ((1)-(8)), the full reactive transport model is given by:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = r(S) + \nabla(d_{diff} \nabla S) + G (\nabla(d_{disp} \nabla S) - v S) \quad (9)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = r(B) + G (\nabla(d_{disp} \nabla B) - v B) \quad (10)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = r(U) \quad \text{for } U = A, R_B, R_S \text{ and } CO_2 \quad (11)$$

where d_{diff} is the effective molecular diffusion coefficient of S , d_{disp} is the effective hydrodynamic dispersion coefficient of S and B and v is their leaching rate. Note that the dispersion coefficient d_{disp} mostly affected the spreading of bacteria, given that substrate was mainly spread by diffusion, as noted in section 2.3 and confirmed by consistent results from equivalent models without hydrodynamic dispersion of S (**Fig. S5**). Effective diffusion and dispersion processes were assumed to be isotropic and uniform at the column-scale. Dispersion and leaching were active only during the observed 1-hour percolation events at days 0, 3 and 6 as controlled by the function G defined as:

$$\begin{aligned} G(t) &= 1 & t &= [0d - 0d1h]; [3d - 3d1h]; [6d - 6d1h] \\ G(t) &= 0 & & \text{otherwise.} \end{aligned} \quad (12)$$

No-flow boundary conditions were imposed at the edges of the soil core ($\nabla S = 0$ and $\nabla B = 0$) during periods outside of the percolation events. The transient evolutions of the water content and their effects on concentrations were not considered because of the short duration of the percolation events (1 h) and the absence of detectable effects on the experimental mineralization curve around the percolation events (**Fig. 1D**). Hydration conditions were considered constant, constrained by the water potential adjusted to -31.6 kPa. No bacterial mobility was observed in the hydrostatic experiments, suggesting that the bacterial mobility observed in the percolation experiments resulted primarily from hydrodynamic dispersion.

Carbon pools concentration dynamics were simulated on a $3 \times 6 \times 6$ regular mesh grid. Although the shape of the grid was slightly different from that of the cylindrical soil-core, it did not have any observable impact (Babey et al., 2017). We recall that substrate and bacteria were initially co-located in the same cube(s). Each cube was considered to be physically, chemically and biologically homogeneous. Diffusion and dispersion were simulated using a finite-difference scheme (Iserles, 2009) and coupled with the bioreactive model, itself solved by the 4th order Runge-Kutta integration method function of MATLAB (Shampine and Reichelt, 1997). The coupling of transport and bioreactive models was achieved with a sequential non-iterative operator-splitting method, in which the equations are resolved within each time step in a sequence of one transport step followed by one bioreactive step (Carrayrou et al., 2004; Lagneau and van der Lee, 2010). The time steps were smaller than the characteristic diffusion and reaction times to avoid any coupling issues.

2.4. Exploratory screening

Parameters and their values are listed in Table 1. Sorption parameters and the diffusion coefficient were set at values that were calibrated and validated by Babey et al. (2017) in independent experiments without degradation. The mortality rate and the nutrient recycling yield were also kept

at the values calibrated in Babey et al. (2017) as they were considered to be well constrained by the residual mineralization dynamics of the homogeneous hydrostatic experiment (**Fig. 1D**). The four biological parameters primarily involved in the biological response of bacteria to the concentration of substrate were determined to be $(1/y) \cdot \mu_{max}$, α , $B(t=0)$ and either $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ for the Monod-based model or $(1/y) \cdot \mu_{max}/(B(t=0) \cdot \kappa_C)$ for the Contois-based model. Each of these four parameters were sampled over 7 logarithmically-distributed values within the theoretically and physically relevant ranges given by Babey et al. (2017), and all possible combinations of values were screened (**Table S2**). We recall that the "maximum uptake efficiency" $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ characterizes the specific bacterial uptake of substrate at the lowest substrate concentration (Button, 1991), while the maximum specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu_{max}$ characterizes the bacterial uptake at the highest substrate concentration. Note that the uptake yield y was fixed at the value calibrated by Babey et al. (2017) with a high degree of certainty. The initial maximum uptake efficiency $(1/y) \cdot \mu_{max}/(B(t=0) \cdot \kappa_C)$ in the Contois-based model was screened in the same range as $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$. The accommodation rate α of the degrader response ranged from a negligible delay of few minutes ($\alpha = 934 \text{ d}^{-1}$) to a prolonged delay of around 10 days ($\alpha = 9.34 \cdot 10^{-2} \text{ d}^{-1}$). $B(t=0)$ values were screened around the initial experimental measurements of the *tfdA* gene copy number, assuming that one *tfdA* sequence corresponded to one bacterium. They ranged over two orders of magnitude to account for the uncertainty of the conversion of *tfdA* copy number into alive 2,4-D degraders (Bælum et al., 2006, 2008). Bacterial density in the uptake efficiency expression will also be expressed in $\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$ (mass of bacteria per volume of water) for a more direct comparison with the relevant literature.

The spatial distribution of bacteria observed at the end of the experiments could not be used to determine the effective dispersion coefficient d_{disp} (**Fig. S2**). While they qualitatively ascertained that bacteria spread orthogonally to the percolation direction, experimental data were not sufficiently resolved to be used quantitatively. The dispersion coefficient was thus screened over 10 values ranging from no dispersion ($d_{disp} = 0$) to complete instant homogenization of the soil core ($d_{disp} = \text{inf}$) (**Table S2**). The effective diffusion coefficient d_{diff} had been calibrated independently from percolation conditions (Pinheiro et al., 2015; Babey et al., 2017). The leaching rates v were determined based on the experimental masses of leached ^{14}C (Pinheiro et al., 2018) (**Table 1**). Detailed values for the screened parameters are listed in **Table S2**.

Table 1. Values and range of values of the reactive transport model. The effective dispersion coefficient d_{disp} applies only to heterogeneous percolation experiments. $B(t=0)$ is the initial density of bacteria in the natural cubes. It is considered 1.6 times smaller in the percolation experiments than in the hydrostatic experiments according to the initial experimental measurements.

Parameter description	Symbol	Unit	Fixed values and admissible ranges for screening
initial substrate	hydrostatic experiment $S(t=0)$	$\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$ (mass of substrate carbon per mass of dry soil)	0.825 ^b

concentration	percolation experiments		$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	6.52 ^b
reversible adsorption coefficient		k_{SA}	d^{-1}	0.09207
reversible desorption coefficient		k_{AS}	d^{-1}	4.361
irreversible adsorption coefficient		k_C	d^{-1}	0.01296
uptake yield		y	-	0.5206
maximum specific uptake rate		$(1/y)\cdot\mu_{max}$	d^{-1}	[0.0190 – 19.5]
uptake efficiency at the lowest substrate concentration		$(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa$ <i>where κ is κ_M or $B(t=0)\cdot\kappa_C$</i>	$\text{g}\cdot\mu\text{g}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (mass of dry soil per mass of bacterial carbon per unit of time)	[0.0152 – 159] ^c
accommodation rate		α	d^{-1}	[0.00934 – 934]
initial degrader population density	hydrostatic experiments	$B(t=0)$	$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (mass of bacterial carbon per mass of dry soil)	[0.0161 – 1.61] ^d
	percolation experiments	$B(t=0)$	$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	[0.0101 – 1.01] ^d
mortality rate		m_t	d^{-1}	0.0602
nutrient recycling yield		χ	-	0.6010
effective diffusion coefficient		d_{diff}	$\text{m}^2\cdot\text{d}^{-1}$	$1 \cdot 10^{-5}$ ^e
effective dispersion coefficient		d_{disp}	$\text{m}^2\cdot\text{d}^{-1}$	[0 – ∞]
leaching rates (days 0; 3; 6)	homogeneous experiments			0.108; 0.226; 0.180
	heterogeneous experiments	ν	-	0.107; 0.223; 0.178

^a The half-saturation constant κ corresponds to κ_M for the Monod-based model and $B(t=0)\cdot\kappa_C$ for the Contois-based model (where $B(t=0)$ is the value from the hydrostatic experiments).

^b The initial substrate concentration $S(t=0)$ is set equal to the ¹⁴C-2,4-D concentration amended in the experiments.

^c The values of $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa$ correspond to ranges of $[1.65 - 1.73 \cdot 10^4] \text{ l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (volume of water per mass of bacteria per unit of time)

^d The values of $B(t=0)$ correspond respectively to ranges of $[1.48 \cdot 10^{-4} - 1.48 \cdot 10^{-2}] \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$ (mass of bacteria per volume of water) for the hydrostatic experiments and $[9.24 \cdot 10^{-5} - 9.24 \cdot 10^{-3}] \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$ for the percolation experiments.

^e The value of d_{diff} has been calibrated on a $3 \times 6 \times 6$ grid in similar conditions (Babey et al., 2017).

2.5. Model to data comparison

The comparison between the results of the model and the experimental data was based on the core-scale data of mineralization deduced from the carbon mass m_{CO_2} of $^{14}\text{CO}_2$ emissions:

$$m_{CO_2}(t) = \int_V CO_2(x, t) dx \quad (13)$$

with V the volume of the soil cores. Mineralization at a given time t was expressed as the carbon mass of cumulated $^{14}\text{CO}_2$ emissions ($m_{CO_2,q}(t)$) per initial carbon mass of ^{14}C -substrate S ($m_{S,q}(t=0)$) where the index q identifies the experiment at hand. Indices 1, 2, 3 and 4 are respectively given to the homogeneous hydrostatic, heterogeneous hydrostatic, homogeneous percolation and heterogeneous percolation experiments. Data-to-model adequacy was assessed for each of the experiments by a classical root-mean-square evaluation function J_q comparing the modeled mineralization of Eq. (4) to the measured mineralization at the n_q available sampling times t_i :

$$J_q = \left(\frac{1}{n_q} \sum_{i=1}^{n_q} \left(\frac{m_{CO_2,q}^{mod}(t_i) - m_{CO_2,q}^{data}(t_i)}{m_{S,q}(t=0)} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

Discrepancies over the full set of experiments J_{1234} were thus expressed as:

$$J_{1234} = \left(\frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 J_k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (15)$$

Following the systematic parameter screening described in section 2.5, the parameter set minimizing J_{1234} was determined and referred to as the set calibrated on both hydrostatic and percolation experiments. The measurement errors were in average 1.7 times higher in the percolation experiments than in the hydrostatic experiments. This was assumed to be due to differences in experimental setup between the two sets of experiments of Pinheiro et al. (2015, 2018). This error difference contributed to limit the weight of the percolation experiments when determining the best-fitting parameter set over the whole set of experiments (J_{1234}). We made the choice to give an equal weight to all experiments by only taking into account the average CO_2 values.

3. Results

3.1. Model calibration

The calibration of the bioreactive transport model carried out using only the hydrostatic experimental data (Babey et al., 2017) led to a minimal discrepancy between data and model of $J_{12} = 0.023$ (**Fig. 3-A1** and **A2**). This pre-existing parameterization was used to provide blind predictions of the percolation experiments, with the effective dispersion coefficient d_{disp} as an additional fitting parameter. It gave a reasonable prediction of mineralization in the homogeneous percolation experiment ($J_3 = 0.038$, **Fig. 3-A3**) but failed in the heterogeneous percolation experiment ($J_4 = 0.151$, **Fig. 3-A4**), regardless of the dispersion coefficient values. The smallest discrepancy J_4 was surprisingly obtained without any bacterial dispersion ($d_{disp} = 0$) in contradiction with the bacterial spread observed in the experimental data (**Fig. S2**). The final predicted mineralization was highest when bacteria remained aggregated close to the initial location of the substrate. The highest predicted mineralization was however four times lower than the experimental data. The large gap between the experimental data and the modeled scenario suggests that bacterial proximity to the initial substrate location is not the underlying explanatory mechanism for the high mineralization rates. On the contrary, it suggests that mineralization might rather be increased by the dispersion of bacteria towards more diluted substrate concentrations, and that the identified bacterial traits do not match this increase of mineralization with dispersion.

In order to investigate the capacity of the reactive transport model to fit both hydrostatic and percolation experimental data, the biological parameters ($(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$, $(1/y) \cdot \mu_{max}$, α , $B(t=0)$) and the dispersion coefficient (d_{disp}) were calibrated on both hydrostatic and percolation experiments following the screening approach given in section 2.4 to minimize J_{1234} . The mineralization dynamics were adequately predicted in all four experiments with the biological parameter set giving the lowest overall discrepancy ($J_{1234} = 0.032$) and a non-zero dispersion coefficient ($d_{disp} = 1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$) (**Fig. 3, Table 2**). The non-zero dispersion coefficient indicates that the calibrated model accounts for a positive impact of bacterial dispersion on degradation. The model results suggest that this effect is necessary to successfully predict the high degree of degradation in the experimental data. Compared to the parameters calibrated only using the hydrostatic experiments, the parameter set calibrated on both hydrostatic and percolation experiments also displayed a much higher maximum uptake efficiency $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M = 26.5 \text{ g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (mass of dry soil per mass of bacterial carbon per unit of time) (**Table 2**). The systematic exploration of the parameter space showed that high maximum uptake efficiency was a common feature of the 1% best-fitting parameterizations over both hydrostatic and percolation experiments (smallest J_{1234}), with values of 159 and $26.5 \text{ g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$, corresponding respectively to $1.73 \cdot 10^4$ and $2.89 \cdot 10^3 \text{ l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (volume of water per mass of bacteria per unit of time). It underlines the essential role of the maximum uptake efficiency for modulating the impact of dispersion on degradation, further detailed and explained in section 3.2.3.

Table 2. Parameters for the Monod-based model calibrated by the screening approach (section 2.4) on the hydrostatic experiments only (Babey et al., 2017) and on both hydrostatic and percolation experiments, and for the Contois-based model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments.

Parameter symbol	Unit	Monod model calibration		Contois model calibration	
		on the sole hydrostatic experiments	on both hydrostatic & percolation experiments	on both hydrostatic & percolation experiments	
$(1/y) \cdot \mu_{max}$	d ⁻¹	1.22	9.73	4.86	
$(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa^a$	g·μg ⁻¹ ·d ⁻¹ (mass of dry soil per mass of bacterial carbon per unit of time)	2.65 ^b	26.5 ^b	2.65 ^b	
α	d ⁻¹	9.341 10 ⁻¹	9.34 10 ⁻²	9.34 10 ⁻²	
$B(t=0)$	hydrostatic experiments	μg·g ⁻¹ (mass of bacterial carbon per mass of dry soil)	1.61 10 ⁻¹	3.23 10 ⁻²	3.76 10 ⁻¹
	percolation experiments	μg·g ⁻¹	1.01 10 ⁻¹	2.01 10 ⁻²	2.34 10 ⁻¹
d_{disp}	m ² ·d ⁻¹	0 ^c	1.78 10 ^{-4 c}	10 ^{-5 c}	
J_{1234}	-	0.079	0.032	0.022	

^a The half-saturation constant κ corresponds to κ_M for the Monod-based model and $B(t=0) \cdot \kappa_C$ for the Contois-based model (where $B(t=0)$ is the value from the hydrostatic experiments).

^b Values of $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa$ correspond respectively to 2.89 10², 2.89 10³ and 2.89 10² l·g⁻¹·d⁻¹ (volume of water per mass of bacteria per unit of time).

^c The corresponding spreading values induced by the hydrodynamic dispersion (root-mean-square displacements) for each percolation events are respectively 0, 3.8 and 0.91 mm, to be compared to the 25 mm radius of the soil column.

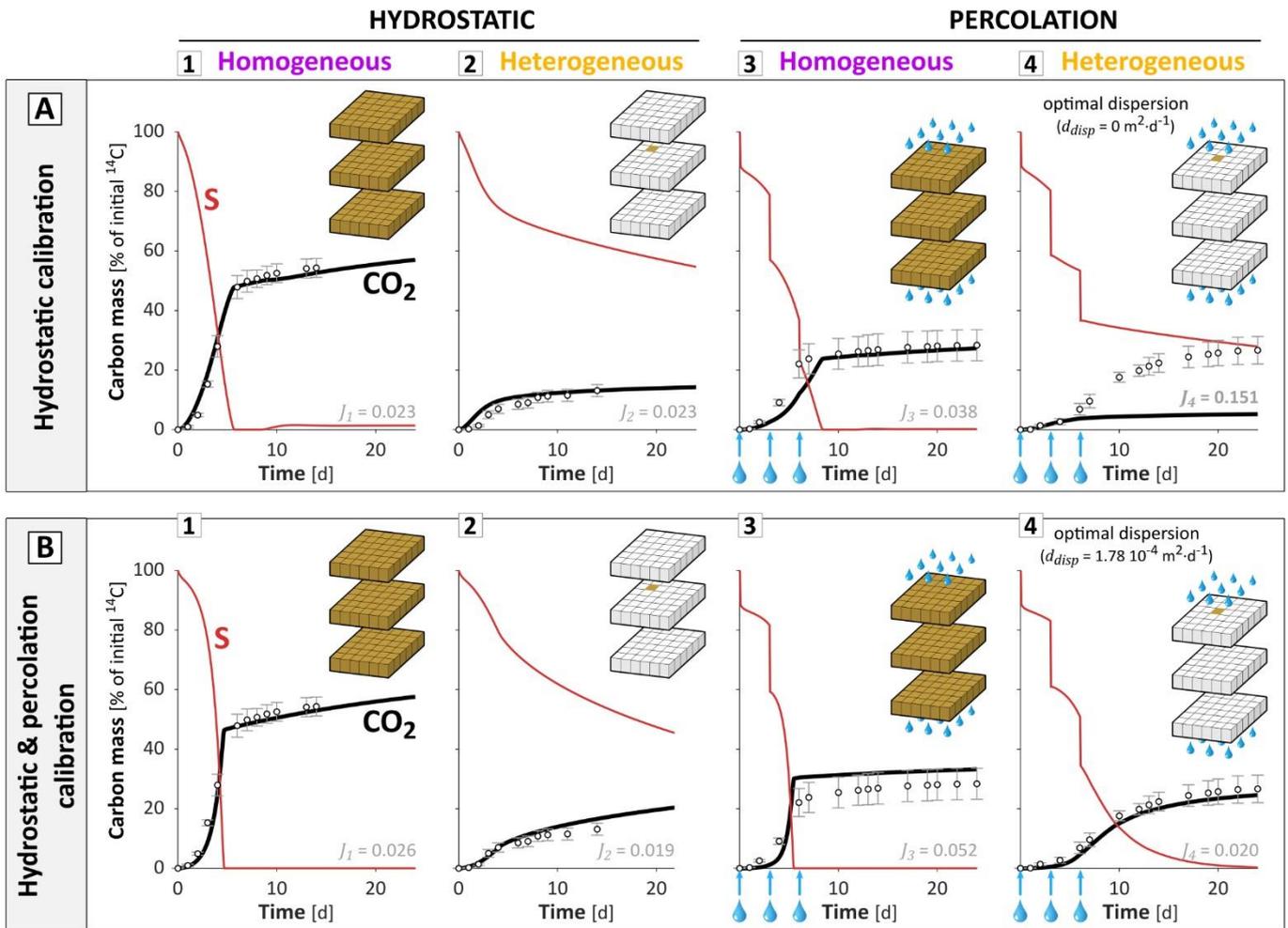


Fig. 3. Mineralization dynamics predicted with the Monod-based model calibrated on the hydrostatic experiment only (**A**) and on both hydrostatic and percolation experiments (**B**). The related experimental setups are indicated in the top right corner of each graph. The agreement between experiments and model is indicated by the value of discrepancy J displayed at the bottom and can be visually assessed by the proximity between the black line and the dots representing respectively the model results and experimental data. The red line refers to the carbon mass of substrate remaining in the soil core. In the percolation experiments (**A3,4** and **B3,4**), around 51% of the initial mass of ^{14}C was lost through leaching at each percolation events ($t = 0, 3$ and 6 days, blue arrows). The carbon balance among the different pools is detailed in **Fig. S7**. Note that the reversible sorption eventually accounted for less than 2% of the initial carbon mass and therefore did not significantly alter the results.

3.2. Analysis of the controls exerted on degradation by substrate dilution and bacterial density

The effect of dispersion on degradation differed greatly between the two calibrated sets of biological parameters described in section 3.1. We therefore conducted a more systematic investigation of the coupled impact of bacterial dispersion and bacterial traits on degradation, revealing its control by substrate dilution and bacterial density.

3.2.1. Impact of dispersion on degradation

We used the mineralization at the end of the experimental time (day 24) as a proxy for degradation and determined its sensitivity to dispersion, as a function of the parameterization of bacterial traits. **Fig. 4** shows the impact of the dispersion coefficient d_{disp} on the final predicted mineralization for the two calibrated biological parameter sets, all other parameters being kept constant (thick red and blue lines). For the biological parameter set calibrated on hydrostatic experiments, the final mineralization decreased monotonically with dispersion (**Fig. 4**, red line). For the parameter set calibrated on both hydrostatic and percolation experiments, the final mineralization first increased, reached a maximum around $d_{disp} \approx 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ and then decreased (**Fig. 4**, blue line). These two kinds of behaviors were observed regardless of the parameters α , $(1/y) \cdot \mu_{max}$ and $B(t=0)$ as long as $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$ remained the same (**Fig. S8**). The non-monotonic impact of dispersion on degradation highlights the existence of an optimal bacterial dispersion for which mineralization is the highest. The comparison between the red and blue lines on **Fig. 4** suggests that the optimal dispersion value depends on the bacterial uptake efficiency. Note that, although the optimal dispersion value varied with time due to the spatial dynamics of both bacteria and substrate (**Fig. S9**), it tended towards a limit that was mostly reached within 4 to 7 days and is thus represented at day 24 on **Fig. 4**.

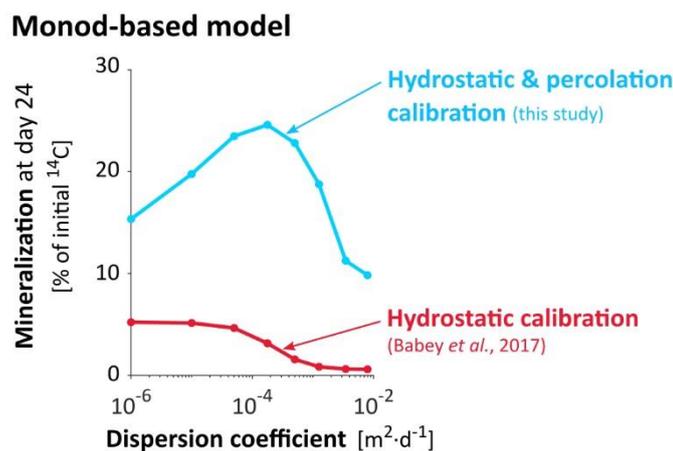


Fig. 4. Influence of the dispersion coefficient d_{disp} on mineralization predicted at day 24 $m_{CO_2}(t=24)$ for the biological parameter set calibrated on the sole hydrostatic experiments (**A**, thick red line) and on both hydrostatic and percolation experiments (**B**, thick blue line). Note that for the model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments, the value of d_{disp} leading to the highest final mineralization ($d_{disp} = 1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$, thick blue line) is also equal to its calibrated value leading to the best adequacy with mineralization kinetics (**Table 2**).

3.2.2. Double control of degradation by substrate dilution and bacterial density

The non-monotonic effect of bacterial dispersion on degradation is an unusual and key feature of the model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments. In the following we will present an explanation for how such relationships between dispersion and degradation could arise, resulting from a non-monotonic spatial substrate profile, itself derived from the respective effects of substrate dilution and bacterial density.

In the model, the instant exposure of bacteria to their substrate is maximal if all the bacteria are located inside the voxel(s) with the highest substrate concentration. In the hydrostatic calibrated parameter set, the profile of substrate concentration primarily resulted from its initial heterogeneity (bell-shape red curve on **Fig. 5A** and pseudo bell-shape red curve on **Fig. 5B**). The flux of substrate reaching each bacterium was therefore mostly determined by the distance between the bacterium and the initial location of substrate. The exposure of a single bacterium to the substrate decreased with its distance from the substrate initial location. This effect is referred to as “substrate dilution”. In these cases (**Fig. 5A** and **B**), mineralization was mainly regulated by substrate dilution, and therefore reduced by bacterial dispersion (**Fig. 4**, blue line). However, for the parameter set calibrated on both hydrostatic and percolation experiments, local degradation by aggregated bacteria reshaped the substrate spatial profile, thus critically changing the voxel(s) with the highest substrate concentration. The bacteria aggregated at their initial location consumed the substrate much faster than it was replenished by backward diffusion and dispersion, creating a critical inversion of the substrate gradient, which led to an intra-population competition for substrate (**Fig. 5C**). The competition was critical for bacterial densities as small as $3.5 \cdot 10^{-3} \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ (**Fig. 5C**). In contrast, the dispersion of bacteria reduced competition by diluting the highest bacterial densities, thus flattening the substrate gradient inversion induced by bacterial local degradation, resulting in a better overall exposure of bacteria to the substrate concentrations, and thus an enhanced mineralization (**Fig. 5D**). In these cases (**Fig. 5C** and **D**), mineralization was mainly regulated by bacterial density. This relation between the bacterial density and the limitation of their exposure to the substrate is not instantaneous and is mediated by the substrate concentration. This is expressed in the model equations through the dependence of bacterial activity $\mu(t)$ on substrate concentration $S(t)$ (Eq. (7)) and the dependence of the substrate concentration $S(t)$ on degradation $\mu(t)\cdot B(t)$ (Eq. (1)), within each voxel. However, when bacterial dispersion was too great, substrate dilution became the dominant control again. This suggests that an optimal bacterial spatial spread exists for which the dilution of substrate is compensated by the dilution of high local bacterial densities. The modeled scenario illustrated by the two calibrated parameter sets were also observed for most of the other parameter sets. The optimal dispersion coefficient for the 300 best-fitting parameterizations to both hydrostatic and percolation experiments (smallest J_{1234} values) was on average $d_{disp} \approx 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2\cdot\text{d}^{-1}$ (**Fig. S10**), corresponding to a root-mean-square displacement of bacteria of 1.5 to 3.5 mm during each percolation event.

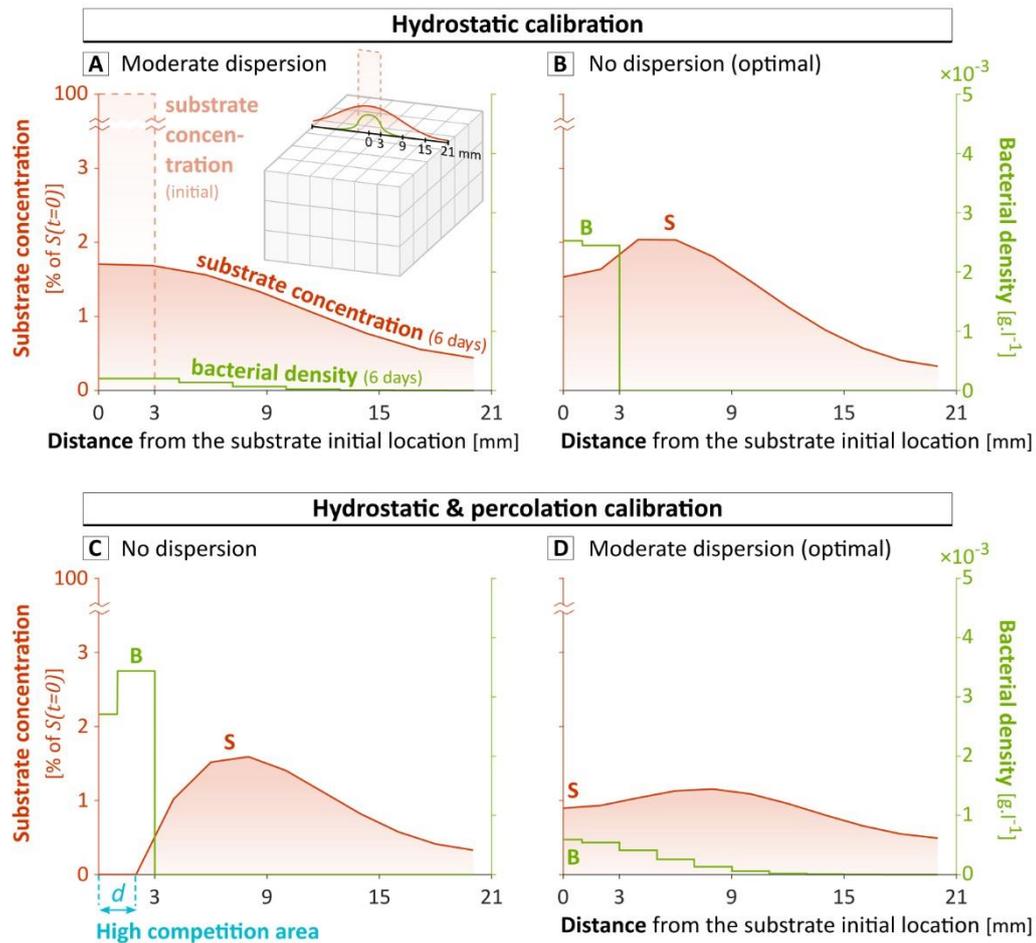


Fig. 5. Predicted substrate and bacterial spatial concentration profiles after 6 days of diffusion and dispersion in the conditions of heterogeneous percolation experiment, in which bacteria and substrate are initially located exclusively in the central cube (between 0 and 3 mm). Results are simulated on a $9 \times 18 \times 18$ grid obtained by subdividing the $3 \times 6 \times 6$ grid used for the screenings. The results are represented for the parameter set calibrated using only the sole hydrostatic experiment, either with a moderate dispersion ($d_{disp} = 1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$) (A) or with the calibrated dispersion (no dispersion) (B), and for the biological parameter set calibrated on both hydrostatic and percolation experiments, either without dispersion (C) or with the calibrated dispersion ($d_{disp} = 1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$) (D). On one hand, bacteria are exposed to smaller substrate concentrations if they are far from the source (right part of the substrate concentration profiles). On the other hand, bacteria undergo competition if they are too close from each other (left part of the substrate concentration profiles). In (C), the bacteria aggregated below d consume the substrate faster than it is replenished by backward diffusion and dispersion. The total number of bacteria within the whole soil column at day 6 is similar in (A), (B), (C) and (D), respectively equal to $6.0 \cdot 10^5$, $9.5 \cdot 10^5$, $11.5 \cdot 10^5$ and $11.3 \cdot 10^5$. The final mineralization at day 24 is however strongly different between scenario, reaching respectively 3.2%, 5.3%, 9.1% and 24.7% of the initial mass of ^{14}C .

3.2.3. Effect of bacterial uptake efficiency on the impact of dispersion on degradation

A non-monotonic substrate concentration profile only occurs when bacterial degradation locally depletes the substrate faster than it is replenished by diffusion. This area of high local competition for substrate results from either high local densities of bacteria or high competitiveness or both.

Bacterial competitiveness is related to their maximum uptake efficiency $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$, which also describes their capacity to maintain their activity and growth under dilute substrate concentrations (Healey, 1980; Button, 1991; Lobry et al., 1992). Bacteria with high maximum uptake efficiency are thus expected to benefit more from dispersion. **Fig. 6** shows the optimal dispersion coefficient as a function of the maximum uptake efficiency, with all other parameters equal to those of the model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments. The optimal dispersion coefficient, defined as the dispersion coefficient maximizing the final mineralization, increased with the maximum uptake efficiency. For small maximum uptake efficiencies of $30 \text{ l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ and below, mineralization was highest in the absence of dispersion, suggesting a regulation dominated by substrate dilution. For larger maximum uptake efficiencies, dispersion impacted positively mineralization, suggesting that degradation shifted from being regulated by substrate dilution to being regulated by bacterial densities, as bacteria were both more prone to competition between themselves and more efficient under diluted substrate conditions. In other words, the proximity to other bacteria constrained activity more than the proximity to the substrate initial location enhanced it. This combined effect of the maximum uptake efficiency and the bacterial dispersion on degradation was a general relationship common to all parameterizations (**Fig. S11**).

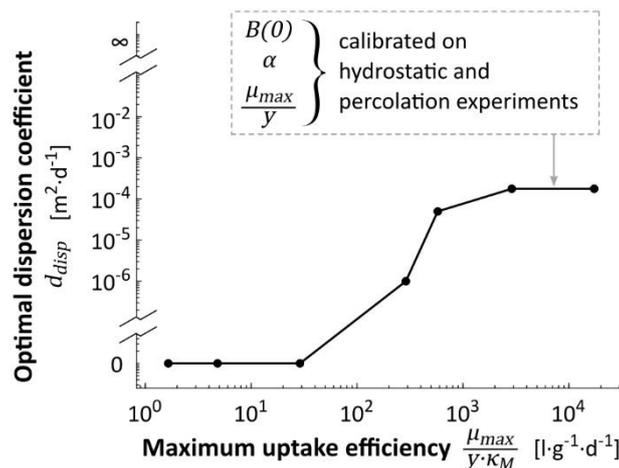


Fig. 6. Dispersion coefficient giving the highest predicted mineralization at day 24 as a function of maximum uptake efficiency, all other parameters equal to those of the model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments.

3.3. The Contois-based model as an alternative to Monod

Given that degradation is regulated by both substrate dilution and bacterial density, and that their relative importance is modulated by bacterial uptake efficiency at the lowest substrate concentration, $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$, we investigated the relevance of the Contois model by applying the calibration methodology of section 2.4, as used in section 3.1. The interest in the Contois growth law (Eq. (8)) stems from the inclusion of a regulation by density in the expression of the uptake efficiency at the lowest substrate concentration, becoming $(1/y) \cdot \mu_{max}/(B(t) \cdot \kappa_C)$.

In comparison with the Monod-based model, the predictions of the experimental observations of Pinheiro et al. (2015, 2019) were facilitated with the Contois-based model, on three levels. First, the Contois-based model captured the degradation dynamics better than the Monod-based model, especially for the 1% best-fitting parameterizations (smallest J_{1234} values) (**Fig. S12**). The calibrated Contois-based model had

an overall discrepancy of $J_{1234} = 0.022$ (Fig. 7), which was smaller than the lowest value of $J_{1234} = 0.032$ obtained for the calibrated Monod-based model (Fig. 3).

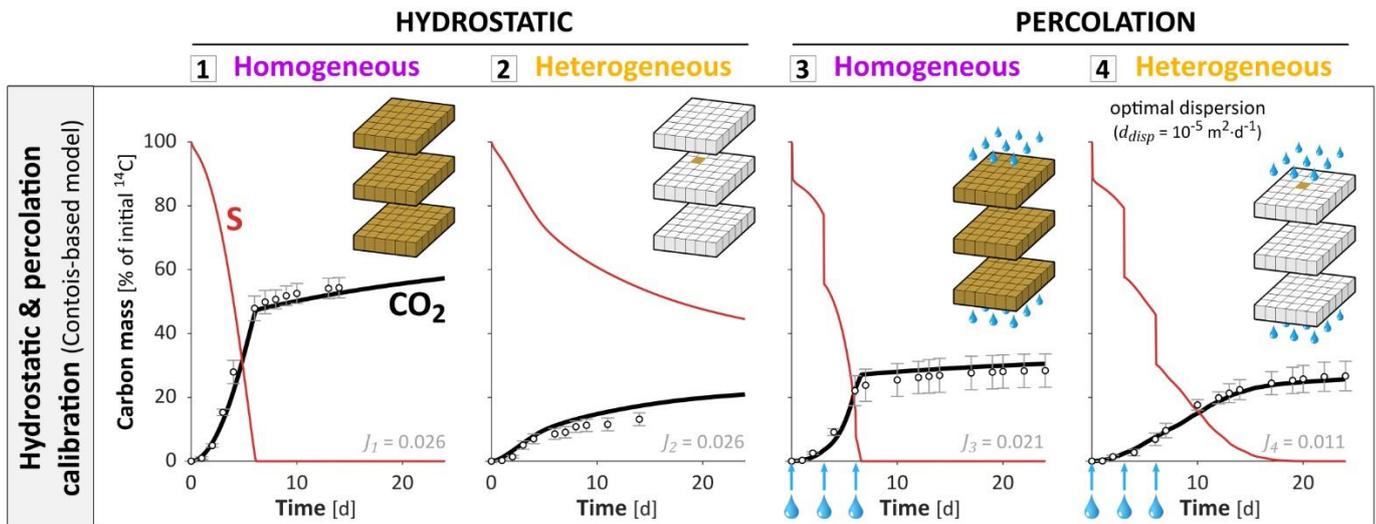


Fig. 7. Mineralization dynamics predicted with the Contois-based model calibrated on both hydrostatic and percolation experiments. For representation and legend, see **Fig. 3**. The carbon balance among the different pools is detailed in **Fig. S7**.

Second, the parameter sets that fitted homogeneous experiments also performed well under heterogeneous conditions, as long as the dispersion coefficient d_{disp} was calibrated as well (**Fig. S13**). It is an important advantage as it confers a better capacity to predict degradation kinetics for heterogeneous and varying distributions, once the model is calibrated in homogeneous conditions, which are more appropriate for the experimental measurement of bacterial parameters. Besides, using a dispersion coefficient value different from the calibrated one weakened the predictions of the mineralization dynamics but not the predictions of the mineralization after 24 days, which remained satisfying regardless of the dispersion coefficient. More precisely, the prediction of the final mineralization became mostly independent of the dispersion coefficient, as shown for the calibrated model (**Fig. 8**). This is because, in the Contois model at low substrate concentrations, the number of active bacteria in a soil volume is exactly counterbalanced by the regulation of their uptake efficiency by population density (Eq. (8)), resulting in limited effects of bacterial spreading on overall mineralization (**Fig. 8**, constant part of the curves).

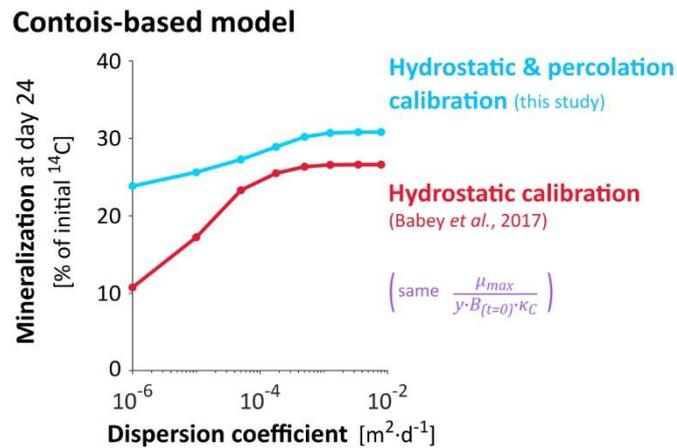


Fig. 8. Influence of the dispersion coefficient on mineralization at day 24 for the Contois-based models calibrated on the sole hydrostatic experiments (thick red line) and on both hydrostatic and percolation experiments (thick blue line). For representation and legend, see **Fig. 4**.

4. Discussion

4.1. Relevance of density control for 2,4-D degradation and soil carbon cycling

4.1.1. Density control of soil oligotroph bacteria

Bulk soil and highly-diluted environments are usually found to be dominated by bacteria with high maximum uptake efficiency, also called oligotrophs (Fierer et al., 2007; Nunan et al., 2020). Their high maximum uptake efficiency differentiates their life-history strategies and conditions their ability to thrive in resource poor environments (Button, 1993), also assimilated to K-strategy (Tecon and Or, 2017), by opposition to copiotrophic bacteria adapted to rich environments (r-strategy). The maximum uptake efficiency values of the 1% best-fitting parameter sets were of the order of 10^3 - 10^4 l·g⁻¹·d⁻¹ (volume of water per mass of bacteria per unit of time), within the range proposed by Button (1991) to define oligotrophs. Similar or higher maximum uptake efficiency values of the order of 10^4 - 10^5 l·g⁻¹·d⁻¹ have been reported for soil oligotrophs (Ohta and Taniguchi, 1988; Zelenev et al., 2005). Values up to $1.64 \cdot 10^5$ have been reported by Tuxen et al. (2002) for 2,4-D degraders in an aerobic aquifer and even greater values might also be possible (see section S5). The high maximum uptake efficiencies predicted in section 3.1 for the best-fitting parameterizations are therefore a plausible bacterial trait among 2,4-D degraders as well as bulk soil bacteria in general. It suggests that density control might be relevant for a component of soil bacteria, which would benefit from dispersion as suggested by **Fig. 6**. The calibrated model has shown in section 3.2.2 that the values of densities from which competition became critical were around $3.5 \cdot 10^{-3}$ g·l⁻¹, corresponding to $7.5 \cdot 10^{-7}$ g·g (mass of bacteria per mass of dry soil), ranging in the low end of usual total soil bacterial densities (Raynaud and Nunan, 2014; Kuzyakov and Blagodatskaya, 2015). This suggests that competition might play a significant role even under the low bacterial densities observed in bulk soils. Reciprocally, the model suggests that competition for substrate between copiotrophic bacteria only appears at much larger population densities, such as those found in soil biofilms (Holden et al., 1997b, Or et al., 2007). Interestingly, copiotrophic bacteria have been reported to cohabit with oligotrophic bacteria even in diluted environments (Gözdereliler et al., 2012). Results from the screening suggest that, for densities of copiotrophs as low as for oligotrophs, their impact on overall

decomposition in dilution-dominated environments would be much lower due to their poorly adapted uptake efficiency (**Fig. 4A**). Conversely, this striking density regulation might be one of the main limitations of the overall population densities in soils. Note that this density regulation occurs within a single population with homogeneous biological constants. Spatial heterogeneities and low substrate concentrations, common in bulk soil, may indeed shift competition from the inter-population level to the intra-population level (Pfeiffer et al., 2001; Roller and Schmidt, 2015).

4.1.2. A new perspective on Regulatory Gate hypothesis

Density regulation might partially contribute to explain the common paradox of the apparent uncoupling between the overall mineralization of a soil volume and the size of its microbial population (Kemmitt et al., 2008). The rate of soil carbon mineralization remains the same even if 90% of the microbial decomposers are killed. This observation is commonly explained by the Regulatory Gate hypothesis, where mineralization is assumed to be controlled by an abiotic process, such as desorption or diffusion, that limits the availability of the substrate, resulting in mineralization rates that are independent of the degrader abundance. We propose that the density regulation of decomposition in oligotrophic environments may contribute to this phenomenon, through competition for substrate or other biological interactions. In the case of competition-related density regulation, it reduces the dependence of the overall carbon mineralization on degrader abundance, as any increase of population density counterbalances the effect of the increased population size. Note that the involved abiotic process, namely the substrate diffusion backward to bacteria (see section 3.2), is well limiting but only in situations of high bacterial competition.

4.2. Relevance of the ratio-dependent Contois model in soils

As argued in section 3.3, ratio-dependence might facilitate decomposition modeling in the soil conditions typical of the experiments analyzed here. The Contois model's $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_{CB}$ calibrated in homogeneous conditions might be used in heterogeneous conditions more reliably than the Monod model's $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$, at least for soil systems in which the competition for the substrate plays a substantial role within the degrader population. The similarity between κ_M and κ_{CB} suggests the need to consider population density when measuring the apparent maximum uptake efficiency of soil bacteria to avoid underestimating it by unintentionally including density regulation. Moreover, the better predictions obtained with the Contois model in the soil conditions represented by the experiments suggest that the Contois ratio-dependence includes not only the effect of competition for substrate at the scale of measurement, but it can also reasonably reflect other density processes such as the spatial variability of bacterial distributions at finer scales related to their high degree of local aggregation in microcolonies (Raynaud and Nunan, 2014). Moreover, ratio-dependence may also include the cumulative effects of ecological interactions other than competition (Sibly and Hone, 2002). Note that the methodological approach used in this study for both Monod and Contois models is based on an effective representation of concentrations and parameters at the mm- to cm-scale of measurements. These effective concentrations and parameters conceptually integrate the smaller-scale processes highlighted by other studies (Ebrahimi and Or, 2014; Portell et al., 2018; Tecon et al., 2018). Such microscale processes should be addressed for further generalization beyond the conditions of the soil experiments analyzed here. Despite its advantages, Contois models have also a drawback with the fact that the modeled uptake efficiency of bacteria approaches infinity for

low densities, which does not correspond to any physical nor biochemical process (Gleeson, 1994; Abrams, 2015). However, this side effect mostly affects a negligible fraction of the bacteria and the substrate, as it was the case in the soil conditions represented by the experiments.

Further work is required to confront the relevance of the Contois model to other soil systems. To the best of our knowledge, ratio-dependent growth models such as the Contois model have not yet been considered for the modeling of microbial degradation in soils. However, the Contois growth equation is generally accepted to be more appropriate than the Monod equation for modeling immobilized, heterogeneously distributed or mixed microbial cultures (Arditi and Saiah, 1992; Harmand and Godon, 2007), all of which are characteristics of soils. The regulation of individual activity by population density has frequently been justified as a “crowding effect” associated with high population densities leading to competition for substrate (Lobry and Harmand, 2006; Harmand and Godon, 2007; Krichen et al., 2018). However, little is known about possible density regulation when apparent microbial densities are low, as is observed in bulk soil (Raynaud and Nunan, 2014; Kuzyakov and Blagodatskaya, 2015), although some studies have mentioned ratio-dependence in highly-diluted environments such as aquifers (Hansen et al., 2017). As discussed in section 4.1.1, the high maximum uptake efficiencies commonly observed for soil bacteria adapted to oligotrophic environments are relevant to draw attention on the potential significance of density control at low densities in oligotrophic soils, and thus ratio-dependent models, among which the Contois model is a consistent choice.

4.3. Hypothetical relationship between bacterial traits and their spatial strategies

Density regulation might be at the origin of a relationship between bacterial oligotrophy, their location in soil and their mobility strategy. Soil copiotroph bacteria have a maximum uptake efficiency mostly between $100 \text{ l}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (Button, 1991) and $800 \text{ l}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (Daugherty and Karel, 1994; Zelenev et al., 2005). For copiotrophs with maximum uptake efficiency values below $288 \text{ l}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$, bacterial dispersion was largely detrimental to their activity (**Fig. 4** blue line, **Fig. 6**), in agreement with the results of Pagel et al. (2020), suggesting that copiotrophs have more aggregated distributions than oligotrophs. The negligible mineralization even without dispersion (**Fig. 3-A4**, **Fig. S8**) also highlights the fact that copiotrophs are particularly inefficient at degrading substrates that diffuse in the environment, as also evidenced by Babey et al. (2017). To maintain significant activity, soil copiotrophs are likely to remain immobile in the close surroundings of the substrate source or any immobile substrate, likely attached to surfaces or embedded in EPS matrices. If not, they would be dispersed towards more diluted area where their low maximum uptake efficiency would result in negligible uptake. On the contrary, to survive and develop, soil oligotrophs should be able to easily disperse and escape high competition areas. Given that soil is a poor and heterogeneous environment, this dispersion would be essentially passive (Nunan et al., 2020), through advective processes for example. We therefore suggest the existence of a theoretical relationship between proximity to substrate sources (respectively remoteness), copiotrophy (respectively oligotrophy) and attachment (respectively mobility).

5. Conclusions

Heterogeneous distributions of degraders and substrate in soils strongly control soil organic matter degradation through their interactions with the bacterial activity. Taking 2,4-D as a model organic solute substrate for soil bacteria, we investigated the coupled effects of bacteria and substrate distributions on one side and bacterial traits on the other side on substrate degradation. The analysis of published experiments with contrasted spreading conditions of both bacteria and substrate reveals that, in addition to the distance of bacteria from high substrate concentrations, mineralization is also surprisingly limited by the bacterial density even under the low bacterial densities commonly observed in bulk soils. Moreover, the impact of bacterial dispersion on solute substrate degradation can shift from negative to positive depending on the bacterial maximum uptake efficiency. The activity of soil oligotrophs may be mostly regulated by bacterial density rather than by substrate dilution, echoing the population size paradox regularly observed. It follows that the ratio-dependent Contois model might be more relevant to model bulk soil mineralization in the heterogeneous conditions investigated than the substrate-dependent Monod model. To predict the impact of spatial distributions on degradation in oligotrophic soil, and more particularly the impact of bacterial dispersion, we suggest that bacterial densities might be a more useful measurement than the volumes of soil devoid or occupied with bacteria. With respect to the current lack of direct microscale data on microbial processes and distributions, we propose some key perspectives on the bacterial kinetics and distributions.

Acknowledgements

This work was supported by the Agence Nationale de la Recherche through the project "Soil μ -3D" [grant number ANR-15-CE01-0006] and was also partially supported by the SLAC Floodplain Hydro-Biogeochemistry Science Focus Area (SFA), which is funded by the U.S. Department of Energy (DOE) office of Biological and Environmental Research (BER), Climate and Environmental Sciences Division, under DOE contract No. DE-AC02-76SF00515 to SLAC. The authors thank Jérôme Harmand, Théodore Bouchez, Xavier Raynaud, Tanguy Le Borgne, Claire Chenu and Holger Pagel for insightful discussions.

References

(également incluses dans la Bibliographie générale de cette thèse)

Abbott, A.J., Nelsestuen, G.L., 1988. The collisional limit: an important consideration for membrane-associated enzymes and receptors. *The FASEB Journal* 2, 2858–2866.

<https://doi.org/10.1096/fasebj.2.13.2844615>

Abrams, P.A., 2015. Why ratio dependence is (still) a bad model of predation: Ratio-dependent predation. *Biological Reviews* 90, 794–814. <https://doi.org/10.1111/brv.12134>

- Arditi, R., Saiah, H., 1992. Empirical evidence of the role of heterogeneity in ratio-dependent consumption. *Ecology* 73, 1544–1551. <https://doi.org/10.2307/1940007>
- Babey, T., Vieublé Gonod, L., Rapaport, A., Pinheiro, M., Garnier, P., de Dreuzy, J.-R., 2017. Spatiotemporal simulations of 2,4-D pesticide degradation by microorganisms in 3D soil-core experiments. *Ecological Modelling* 344, 48–61. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2016.11.006>
- Bælum, J., Henriksen, T., Hansen, H.C.B., Jacobsen, C.S., 2006. Degradation of 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid in top- and subsoil is quantitatively linked to the class III *tfdA* gene. *Applied and Environmental Microbiology* 72, 1476–1486. <https://doi.org/10.1128/AEM.72.2.1476-1486.2006>
- Bælum, J., Nicolaisen, M.H., Holben, W.E., Strobel, B.W., Sørensen, J., Jacobsen, C.S., 2008. Direct analysis of *tfdA* gene expression by indigenous bacteria in phenoxy acid amended agricultural soil. *The ISME Journal* 2, 677–687. <https://doi.org/10.1038/ismej.2008.21>
- Balkwill, D.L., Leach, F.R., Wilson, J.T., McNabb, J.F., White, D.C., 1988. Equivalence of microbial biomass measures based on membrane lipid and cell wall components, adenosine triphosphate, and direct counts in subsurface aquifer sediments. *Microbial Ecology* 16, 73–84. <https://doi.org/10.1007/BF02097406>
- Boivin, A., Amellal, S., Schiavon, M., van Genuchten, M.Th., 2005. 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) sorption and degradation dynamics in three agricultural soils. *Environmental Pollution* 138, 92–99. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2005.02.016>

Breitenbeck, G.A., Yang, H., Dunigan, E.P., 1988. Water-facilitated dispersal of inoculant

Bradyrhizobium japonicum in soils. *Biology and Fertility of Soils* 7, 58–62.

<https://doi.org/10.1007/BF00260733>

Bünemann, E.K., Bongiorno, G., Bai, Z., Creamer, R.E., De Deyn, G., de Goede, R., Fleskens, L.,

Geissen, V., Kuyper, T.W., Mäder, P., Pulleman, M., Sukkel, W., van Groenigen, J.W., Brussaard,

L., 2018. Soil quality – A critical review. *Soil Biology and Biochemistry* 120, 105–125.

<https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.01.030>

Button, D.K., 1978. On the theory of control of microbial growth kinetics by limiting nutrient

concentrations. *Deep Sea Research* 25, 1163–1177. <https://doi.org/10.1016/0146->

6291(78)90011-5

Button, D.K., 1983. Differences between the kinetics of nutrient uptake by micro-organisms, growth

and enzyme kinetics. *Trends in Biochemical Sciences* 8, 121–124.

[https://doi.org/10.1016/0968-0004\(83\)90232-3](https://doi.org/10.1016/0968-0004(83)90232-3)

Button, D.K., 1991. Biochemical basis for whole-cell uptake kinetics: specific affinity, oligotrophic

capacity, and the meaning of the michaelis constant. *Applied and Environmental*

Microbiology 57, 2033–2038.

Button, D.K., 1993. Nutrient-limited microbial growth kinetics: overview and recent advances.

Antonie van Leeuwenhoek 63, 225–235. <https://doi.org/10.1007/BF00871220>

Carrayrou, J., Mosé, R., Behra, P., 2004. Operator-splitting procedures for reactive transport and

comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology* 68, 239–268.

[doi:10.1016/S0169-7722\(03\)00141-4](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(03)00141-4)

Cheyens, K., Mertens, J., Diels, J., Smolders, E., Springael, D., 2010. Monod kinetics rather than a first-order degradation model explains atrazine fate in soil mini-columns: Implications for pesticide fate modelling. *Environmental Pollution* 158, 1405–1411.

<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2009.12.041>

Contois, D.E., 1959. Kinetics of bacterial growth: relationship between population density and specific growth rate of continuous cultures. *Journal of General Microbiology* 21, 40–50.

<https://doi.org/10.1099/00221287-21-1-40>

Daugherty, D.D., Karel, S.F., 1994. Degradation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid by *Pseudomonas cepacia* DBOL(pRO101) in a dual-substrate chemostat. *Applied and Environmental Microbiology* 60, 3261–3267.

Dechesne, A., Owsianiak, M., Bazire, A., Grundmann, G.L., Binning, P.J., Smets, B.F., 2010.

Biodegradation in a partially saturated sand matrix: compounding effects of water content, bacterial spatial distribution, and motility. *Environmental Science & Technology* 44, 2386–2392. <https://doi.org/10.1021/es902760y>

Dechesne, A., Badawi, N., Amand, J., Smets, B.F., 2014. Fine scale spatial variability of microbial pesticide degradation in soil: scales, controlling factors, and implications. *Frontiers in Microbiology* 5, 667. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2014.00667>

Desmond-Le Quéméner, E., Bouchez, T., 2014. A thermodynamic theory of microbial growth. *The ISME Journal* 8, 1747–1751. doi:10.1038/ismej.2014.7

Don, R.H., Weightman, A.J., 1985. Transposon mutagenesis and cloning analysis of the pathways for degradation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid and 3-chlorobenzoate in *Alcaligenes eutrophus* JMP134(pJP4). *Journal of Bacteriology* 161, 85–90.

- Ebrahimi, A.N., Or, D., 2014. Microbial dispersal in unsaturated porous media: Characteristics of motile bacterial cell motions in unsaturated angular pore networks. *Water Resources Research* 50, 7406–7429. doi:10.1002/2014WR015897
- Fierer, N., Bradford, M.A., Jackson, R.B., 2007. Toward an ecological classification of soil bacteria. *Ecology* 88, 1354–1364. <https://doi.org/10.1890/05-1839>
- Gleeson, S.K., 1994. Density dependence is better than ratio dependence. *Ecology* 75, 1834–1835. <https://doi.org/10.2307/1939642>
- Gözdereliler, E., Boon, N., Aamand, J., De Roy, K., Granitsiotis, M.S., Albrechtsen, H.J., Sørensen, S.R., 2012. Comparing metabolic functionality, community structure and dynamics of herbicide-degrading communities. *Applied and Environmental Microbiology*.
- Haegeman, B., Rapaport, A., 2008. How flocculation can explain coexistence in the chemostat. *Journal of Biological Dynamics* 2, 1–13. <https://doi.org/10.1080/17513750801942537>
- Hammond, E.C., 1938. Biological effects of population density in lower organisms. *The Quarterly Review of Biology* 13, 421–438. <http://www.jstor.org/stable/2808555>
- Hansen, S.K., Pandey, S., Karra, S., Vesselinov, V.V., 2017. CHROTRAN: A mathematical and computational model for in situ heavy metal remediation in heterogeneous aquifers. *ArXiv:1703.01381 [q-Bio]*.
- Harmand, J., Godon, J.J., 2007. Density-dependent kinetics models for a simple description of complex phenomena in macroscopic mass-balance modeling of bioreactors. *Ecological Modelling* 200, 393–402. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2006.08.012>
- Healey, F.P., 1980. Slope of the Monod equation as an indicator of advantage in nutrient competition. *Microbial Ecology* 5, 281–286. <http://www.jstor.org/stable/4250586>

Holden, P.A., Firestone, M.K., 1997a. Soil microorganisms in soil cleanup: How can we improve our understanding? *Journal of Environment Quality* 26, 32–40.

<https://doi.org/10.2134/jeq1997.00472425002600010006x>

Holden, P.A., Hunt, J.R., Firestone, M.K., 1997b. Toluene diffusion and reaction in unsaturated *Pseudomonas putida* biofilms. *BIOTECHNOLOGY AND BIOENGINEERING* 56, 15.

Iserles, A., 2009. *A first course in the numerical analysis of differential equations*, Cambridge University Press. ed.

Juyal, A., Otten, W., Falconer, R., Hapca, S., Schmidt, H., Baveye, P.C., Eickhorst, T., 2019.

Combination of techniques to quantify the distribution of bacteria in their soil microhabitats at different spatial scales. *Geoderma* 334, 165–174.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.07.031>

Kemmitt, S.J., Lanyon, C.V., Waite, I.S., Wen, Q., Addiscott, T.M., Bird, N.R.A., O'Donnell, A.G.,

Brookes, P.C., 2008. Mineralization of native soil organic matter is not regulated by the size, activity or composition of the soil microbial biomass—a new perspective. *Soil Biology and Biochemistry* 40, 61–73. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2007.06.021>

Koch, A.L., 1971. The adaptive responses of *Escherichia coli* to a feast and famine existence, in:

Advances in Microbial Physiology. Elsevier, pp. 147–217. [https://doi.org/10.1016/S0065-2911\(08\)60069-7](https://doi.org/10.1016/S0065-2911(08)60069-7)

König, S., Vogel, H.-J., Harms, H., Worrlich, A., 2020. Physical, chemical and biological effects on soil bacterial dynamics in microscale models. *Frontiers in Ecology and Evolution* 8, 53.

<https://doi.org/10.3389/fevo.2020.00053>

- Krichen, E., Harmand, J., Torrijos, M., Godon, J.J., Bernet, N., Rapaport, A., 2018. High biomass density promotes density-dependent microbial growth rate. *Biochemical Engineering Journal* 130, 66–75. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2017.11.017>
- Kuzyakov, Y., Blagodatskaya, E., 2015. Microbial hotspots and hot moments in soil: Concept & review. *Soil Biology and Biochemistry* 83, 184–199. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2015.01.025>
- Lagneau, V., van der Lee, J., 2010. Operator-splitting-based reactive transport models in strong feedback of porosity change: The contribution of analytical solutions for accuracy validation and estimator improvement. *Journal of Contaminant Hydrology* 112, 118–129. [doi:10.1016/j.jconhyd.2009.11.005](https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2009.11.005)
- Lobry, C., Harmand, J., 2006. A new hypothesis to explain the coexistence of n species in the presence of a single resource. *Comptes Rendus Biologies* 329, 40–46. <https://doi.org/10.1016/j.crv.2005.10.004>
- Lobry, J.R., Flandrois, J.P., Carret, G., Pave, A., 1992. Monod's bacterial growth model revisited. *Bulletin of Mathematical Biology* 54, 117–122. <https://doi.org/10.1007/BF02458623>
- Madsen, E.L., Alexander, M., 1982. Transport of Rhizobium and Pseudomonas through Soil. *Soil Science Society of America Journal* 46, 557–560. <https://doi.org/10.2136/sssaj1982.03615995004600030023x>
- Monod, J., 1949. The growth of bacterial cultures. *Annual Review of Microbiology* 3, 371–394. <https://doi.org/10.1146/annurev.mi.03.100149.002103>

- Nelson, M.I., Holder, A., 2009. A fundamental analysis of continuous flow bioreactor models governed by Contois kinetics. II. Reactor cascades. *Chemical Engineering Journal* 149, 406–416. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.01.028>
- Nunan, N., Young, I.M., Crawford, J.W., Ritz, K., 2007. Bacterial interactions at the microscale - Linking habitat to function in soil, in: Franklin, R., Mills, A. (Eds.), *The Spatial Distribution of Microbes in the Environment*. Springer, Dordrecht, pp. 61–85.
- Nunan, N., Schmidt, H., Raynaud, X., 2020. The ecology of heterogeneity: soil bacterial communities and C dynamics. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences* 375, 20190249. <https://doi.org/10.1098/rstb.2019.0249>
- Ohta, H., Taniguchi, S., 1988. Growth characteristics of the soil oligotrophic bacterium: *Agromonas oligotrophica* JCM 1494 on diluted nutrient broth. *The Journal of General and Applied Microbiology* 34, 349–353. <https://doi.org/10.2323/jgam.34.349>
- Or, D., Smets, B.F., Wraith, J.M., Dechesne, A., Friedman, S.P., 2007. Physical constraints affecting bacterial habitats and activity in unsaturated porous media – a review. *Advances in Water Resources* 30, 1505–1527. doi:10.1016/j.advwatres.2006.05.025
- Pagel, H., Kriesche, B., Uksa, M., Poll, C., Kandeler, E., Schmidt, V., Streck, T., 2020. Spatial control of carbon dynamics in soil by microbial decomposer communities. *Frontiers in Environmental Science* 8, 2. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2020.00002>
- Pallud, C., Dechesne, A., Gaudet, J.P., Debouzie, D., Grundmann, G.L., 2004. Modification of spatial distribution of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid degrader microhabitats during growth in soil columns. *Applied and Environmental Microbiology* 70, 2709–2716. <https://doi.org/10.1128/AEM.70.5.2709-2716.2004>

- Patarinska, T., Dochain, D., Agathos, S.N., Ganovski, L., 2000. Modelling of continuous microbial cultivation taking into account the memory effects. *Bioprocess Engineering* 22, 517–527. <https://doi.org/10.1007/s004499900095>
- Pfeiffer, T., Schuster, S., Bonhoeffer, S., 2001. Cooperation and Competition in the Evolution of ATP-Producing Pathways 292, 5.
- Pieper, D.H., Reineke, W., Engesser, K.-H., Knackmuss, H.-J., 1988. Metabolism of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid, 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid and 2-methylphenoxyacetic acid by *Alcaligenes eutrophus* JMP 134. *Archives of Microbiology* 150, 95–102. <https://doi.org/10.1007/BF00409724>
- Pinheiro, M., Garnier, P., Beguet, J., Martin Laurent, F., Vieublé Gonod, L., 2015. The millimetre-scale distribution of 2,4-D and its degraders drives the fate of 2,4-D at the soil core scale. *Soil Biology and Biochemistry* 88, 90–100. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2015.05.008>
- Pinheiro, M., Pagel, H., Poll, C., Ditterich, F., Garnier, P., Streck, T., Kandeler, E., Vieublé Gonod, L., 2018. Water flow drives small scale biogeography of pesticides and bacterial pesticide degraders - A microcosm study using 2,4-D as a model compound. *Soil Biology and Biochemistry* 127, 137–147. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.09.024>
- Poll, C., Ingwersen, J., Stemmer, M., Gerzabek, M.H., Kandeler, E., 2006. Mechanisms of solute transport affect small-scale abundance and function of soil microorganisms in the detritusphere. *European Journal of Soil Science* 57, 583–595. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.2006.00835.x>

- Portell, X., Pot, V., Garnier, P., Otten, W., Baveye, P.C., 2018. Microscale Heterogeneity of the Spatial Distribution of Organic Matter Can Promote Bacterial Biodiversity in Soils: Insights From Computer Simulations. *Frontiers in Microbiology* 9, 1583. doi:10.3389/fmicb.2018.01583
- Rapaport, A., 2018. Properties of the chemostat model with aggregated biomass. *European Journal of Applied Mathematics* 29, 972–990. <https://doi.org/10.1017/S0956792518000141>
- Raynaud, X., Nunan, N., 2014. Spatial Ecology of Bacteria at the Microscale in Soil. *PLoS ONE* 9, e87217. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0087217>
- Read, C.P., 1951. The “Crowding Effect” in Tapeworm Infections. *The Journal of Parasitology* 37, 174–178. <https://doi.org/10.2307/3273449>
- Roller, B.R., Schmidt, T.M., 2015. The physiology and ecological implications of efficient growth. *The ISME Journal* 9, 1481–1487. <https://doi.org/10.1038/ismej.2014.235>
- Shampine, L.F., Reichelt, M.W., 1997. The MATLAB ODE Suite. *SIAM Journal on Scientific Computing* 18, 1–22. <https://doi.org/10.1137/S1064827594276424>
- Sibly, R.M., Hone, J., 2002. Population growth rate and its determinants: an overview. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences* 357, 1153–1170. <https://doi.org/10.1098/rstb.2002.1117>
- Sinton, G.L., Fan, L.T., Erickson, L.E., Lee, S.M., 1986. Biodegradation of 2,4-D and related xenobiotic compounds. *Enzyme and Microbial Technology* 8, 395–403. [https://doi.org/10.1016/0141-0229\(86\)90145-6](https://doi.org/10.1016/0141-0229(86)90145-6)
- Smoluchowski, M. v, 1918. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 92U, 129–168. <https://doi.org/10.1515/zpch-1918-9209>

- Tecon, R., Or, D., 2017. Biophysical processes supporting the diversity of microbial life in soil. *FEMS Microbiology Reviews* 41, 599–623. <https://doi.org/10.1093/femsre/fux039>
- Tecon, R., Ebrahimi, A., Kleyer, H., Erev Levi, S., Or, D., 2018. Cell-to-cell bacterial interactions promoted by drier conditions on soil surfaces. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 115, 9791–9796. doi:10.1073/pnas.1808274115
- Tuxen, N., de Liphay, J.R., Albrechtsen, H.-J., Aamand, J., Bjerg, P.L., 2002. Effect of exposure history on microbial herbicide degradation in an aerobic aquifer affected by a point source. *Environmental Science & Technology* 36, 2205–2212. <https://doi.org/10.1021/es0113549>
- Ugalde-Salas, P., Desmond-Le Quéméner, E., Harmand, J., Rapaport, A., Bouchez, T., 2020. Insights from Microbial Transition State Theory on Monod's Affinity Constant. *Scientific Reports* 10, 5323. doi:10.1038/s41598-020-62213-6
- Vieublé Gonod, L., Chenu, C., Soulas, G., 2003. Spatial variability of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) mineralisation potential at a millimetre scale in soil. *Soil Biology and Biochemistry* 35, 373–382. [https://doi.org/10.1016/S0038-0717\(02\)00287-0](https://doi.org/10.1016/S0038-0717(02)00287-0)
- Young, I.M., Crawford, J.W., Nunan, N., Otten, W., Spiers, A., 2008. Chapter 4 Microbial distribution in soils, in: *Advances in Agronomy*. Elsevier, pp. 81–121. [https://doi.org/10.1016/S0065-2113\(08\)00604-4](https://doi.org/10.1016/S0065-2113(08)00604-4)
- Zelenev, V.V., van Bruggen, A.H.C., Semenov, A.M., 2005. Modeling wave-like dynamics of oligotrophic and copiotrophic bacteria along wheat roots in response to nutrient input from a growing root tip. *Ecological Modelling* 188, 404–417. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2005.01.046>

III.1.3. Matériel supplémentaire

Article title: Competition within low-density bacterial populations as an unexpected factor regulating carbon mineralization in bulk soil

Authors: Alexandre Coche, Tristan Babey, Alain Rapaport, Laure Vieublé Gonod, Patricia Garnier, Naoise Nunan, Jean Raynald de Dreuzy

The following supporting information is available for this article:

S.1. Experimental conditions of soil-column laboratory experiments	135
<ul style="list-style-type: none"> • Fig. S1. Set up of the soil column experiments • Table S1. Experimental conditions for the four experiments • Fig. S2. Final experimental millimeter spatial distributions of bacteria 	
S.2. Screening	138
<ul style="list-style-type: none"> • Table S2. Detailed parameter values used in the screenings 	
S.3. Transport model	140
<ul style="list-style-type: none"> • Fig. S3. Impact of dispersion anisotropy • Fig. S4. Impact of dispersion on mineralization predicted at day 24, depending on the scenario of bacteria leaching • Fig. S5. Impact of dispersion on mineralization predicted at day 24, with or without hydrodynamic dispersion of substrate 	
S.4. Supplementary results.....	144
<ul style="list-style-type: none"> • Fig. S6. Main modeling results without the explicit bacterial accommodation rate α • Fig. S7. Carbon mass balance for the Monod based and the Contois based models • Fig. S8. Influence of the dispersion coefficient on mineralization predicted at day 24 for the different calibrated biological parameter sets • Fig. S9. Convergence of optimal bacterial spreading with time • Fig. S10. Relevance of bacterial spreading • Fig. S11. Impact of maximum uptake efficiency on the optimal dispersion coefficient • Fig. S12. Adequacy between simulations and experiments under Monod-based and Contois-based models • Fig. S13. Predictive capacities of Monod-based and Contois-based models for aggregated and dispersive conditions 	
S.5. Theoretical collision frequency between bacteria and solute substrate	156

S.1. Experimental conditions of soil-column laboratory experiments

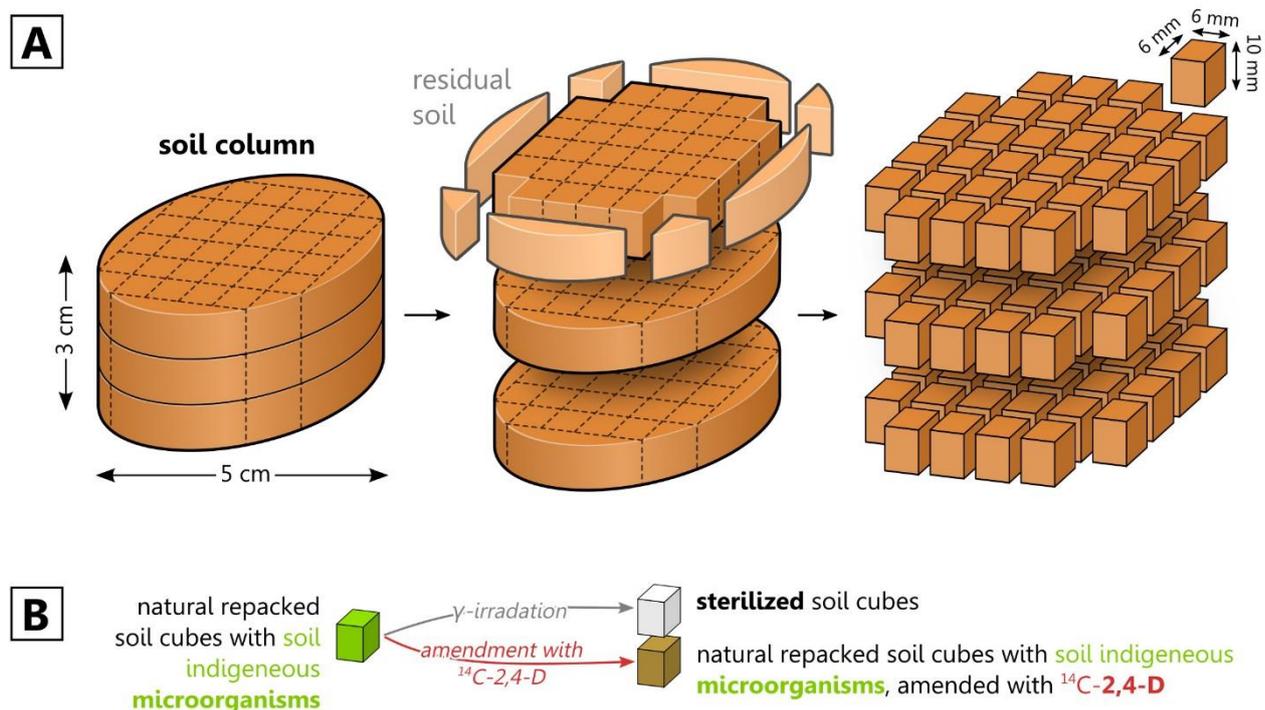


Fig. S1. Set up of the soil column experiments. **(A)** Decomposition of cylindrical soil columns into 96 soil cubes. **(B)** Schematic representation of the different types of soil cubes. Soil columns were 5 cm large and 3 cm high and were composed of 0.6 g soil cubes of approximately 6 mm \times 6 mm \times 10 mm. Each cube was packed with 2-3.15 mm soil aggregates sieved from a soil sampled from the ploughed layer (0-30 cm) of an agricultural field cultivated without any 2,4-D application for the last 15 years. The different types of soil aggregates were obtained by irradiation and amendment prior to being repacked into the soil column. The water potential of the soil column was kept at -31.6 kPa (pF 2.5), corresponding to a water content of 0.205 g·g⁻¹ (mass of water per mass of dry soil) and a pore saturation of 54% (volume of water per volume of pores). The apparent density of the soil column was 1.3 10³ g·l⁻¹ (mass of dry soil per apparent soil volume).

Table S1.

Experimental conditions for each experiment. Diffusion applies only to the substrate (^{14}C -2,4-D), whereas hydrodynamic dispersion applies to both substrate and bacterial degraders. Diffusion and dispersion reshape the column-scale distributions of mobile species only in heterogeneous experiments, as indicated by the grey shading.

		Effective diffusion coefficient d_{diff} [m ² ·d ⁻¹]	Initial degraders density $B(t=0)$ [g ⁻¹] (number of <i>tfdA</i> gene copies per mass of dry soil)	Initial ^{14}C -2,4-D concentration $S(t=0)$ [g·g ⁻¹] (mass of 2,4-D per mass of dry soil)	Percolation events
Hydrostatic experiments	homogeneous	0.6 10 ⁻⁵ ^a	4.65 10 ⁵ ^b	1.9 10 ⁻⁶ ^c	no percolation
	heterogeneous	0.6 10 ⁻⁵ ^a	4.65 10 ⁵ ^b	1.9 10 ⁻⁶ ^c	no percolation
Percolation experiments	homogeneous	0.6 10 ⁻⁵ ^a	2.90 10 ⁵ ^b	15 10 ⁻⁶ ^c	leaching and hydrodynamic dispersion
	heterogeneous	0.6 10 ⁻⁵ ^a	2.90 10 ⁵ ^b	15 10 ⁻⁶ ^c	leaching and hydrodynamic dispersion

^a The values of d_{diff} correspond to the value of 2,4-D effective diffusion coefficient from [Babey et al. \(2017\)](#) calibrated on a 6 × 12 × 12 grid in similar conditions. Note that the diffusion coefficient was calibrated at 1 10⁻⁵ m²·d⁻¹ on a 3 × 6 × 6 grid.

^b $B(t=0)$ values for the hydrostatic and percolation experiments correspond respectively to 2.27 10⁹ and 1.42 10⁹ l⁻¹ (number of *tfdA* gene copies per volume of water).

^c $S(t=0)$ values for the hydrostatic and percolation experiments correspond respectively to solute concentrations of 41.9 and 331 μmol·l⁻¹ (amount of 2,4 D per volume of water)

Heterogeneous experiments

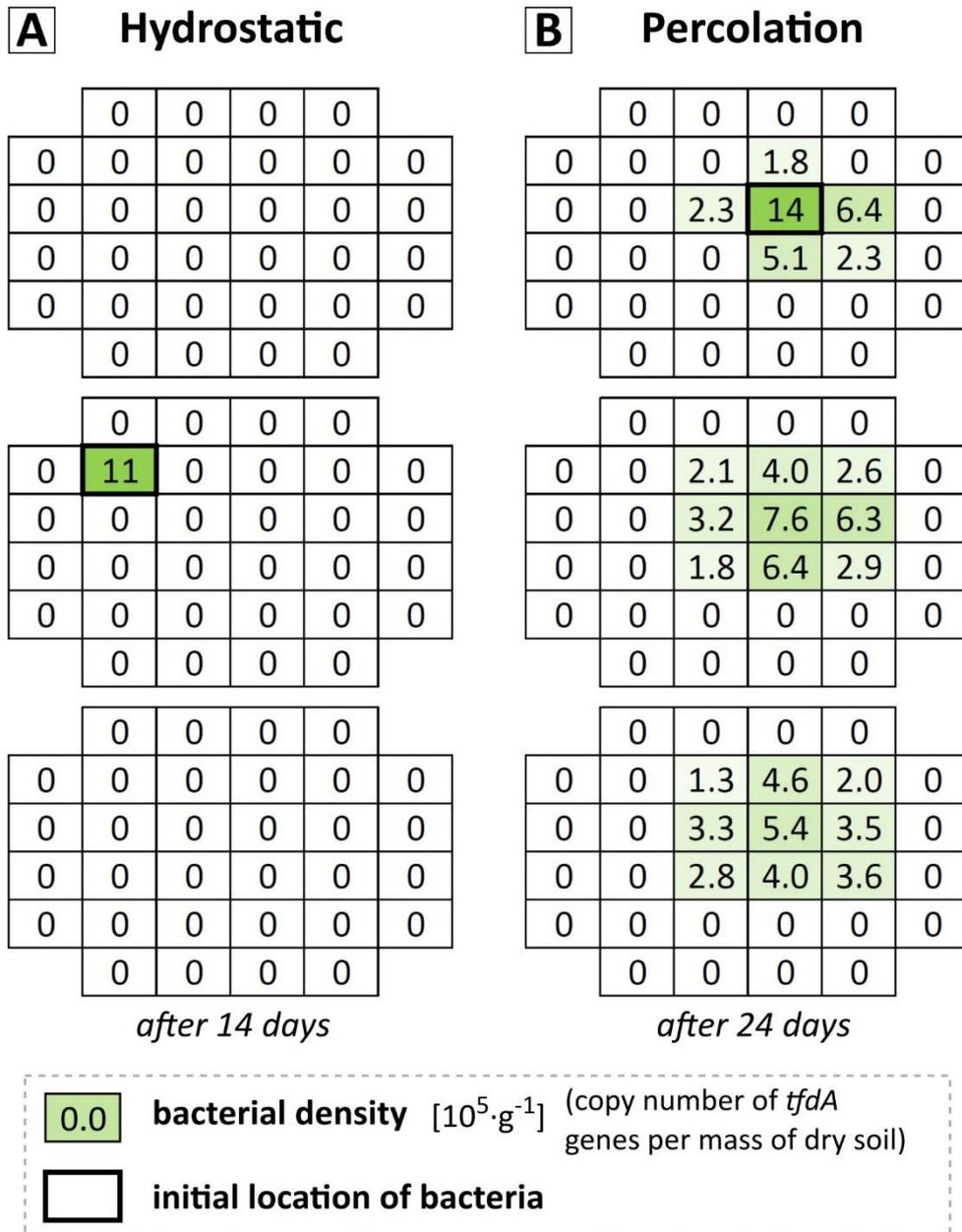


Fig. S2. Final experimental millimeter spatial distributions of bacteria, in the heterogeneous experiments (left and right). The 96 experimental cubes are represented on 3 grids corresponding to the 3 layers (top, middle and bottom). The values refer to the final *tfdA* measurements, also assessed by the green color scale. The cell with bold outlines refers to the initial locations of bacteria. The detection limit was $0.12 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$ (copies of *tfdA* sequences per mass of dry soil). Adapted from Pinheiro et al. (2018). Permission for reproduction granted by Elsevier.

S.2. Screening

Table S2.

Detailed parameter values used in the screenings. Blue cells refer to the parameterization of the biochemical model (Eqs. (1)-(8)) calibrated on the sole hydrostatic experiments by Babey et al. (2017), and numbers in blue refer to the ratio to these values. Green cells refer to the number of copies of *tfdA* gene measured by Pinheiro et al. (2018, 2015). The screened values of the four biological parameters were chosen to be more refined around the values previously calibrated on the sole hydrostatic experiments (blue cells). The values of d_{disp} were chosen to be regularly spaced on a log scale, supplemented by a value for no dispersion ($d_{disp} = 0$) and a value for instant homogeneous distribution ($d_{disp} = \infty$). The broad range of α (five orders of magnitude) accounted for conditions of negligible delay of few minutes ($\alpha = 934 \text{ d}^{-1}$) to prolonged delay of around 10 days ($\alpha = 9.34 \cdot 10^{-2} \text{ d}^{-1}$). The 2 orders of magnitude range of $B(t=0)$ accounted for the uncertainty on the conversion of *tfdA* copy number into alive bacterial degraders (Bælum et al., 2008, 2006).

Biological parameters	Unit	Screened values									
Maximum specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu_{max}$	d^{-1}	0.0190	0.608	1.22	2.43	4.86	9.73	19.5			
	ratio	1/64	1/2	1	2	4	8	16			
Maximum uptake efficiency $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa^a$	$\text{g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (mass of dry soil per mass of bacterial carbon per unit of time)	0.0152	0.0442	0.265	2.65	5.31	26.5	159			
	$\text{l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (volume of water per mass of bacteria per unit of time)	1.65	4.81	$2.89 \cdot 10^1$	$2.89 \cdot 10^2$	$5.78 \cdot 10^2$	$2.89 \cdot 10^3$	$1.73 \cdot 10^4$			
	ratio	1/175	1/60	1/10	1	2	10	60			
Accommodation rate α	d^{-1}	0.00934	0.0187	0.0934	0.934	9.34	93.4	934			
	ratio	1/100	1/50	1/10	1	10	100	1000			
Initial degraders population density $B(t=0)^b$	Hydrostatic exp	$\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$	0.0161	0.0323	0.0692	0.161	0.376	0.807	1.61		
		$\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$	$1.48 \cdot 10^{-4}$	$2.96 \cdot 10^{-4}$	$6.36 \cdot 10^{-4}$	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$3.45 \cdot 10^{-3}$	$7.41 \cdot 10^{-3}$	$1.48 \cdot 10^{-2}$		
	Percolation exp	ratio	1/10	1/5	1/2.33	1	2.33	5	10		
		$\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$	0.0101	0.0201	0.0432	0.101	0.234	0.503	1.01		
		$\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$	$9.24 \cdot 10^{-5}$	$1.85 \cdot 10^{-4}$	$3.97 \cdot 10^{-4}$	$9.24 \cdot 10^{-4}$	$2.15 \cdot 10^{-3}$	$4.62 \cdot 10^{-3}$	$9.24 \cdot 10^{-3}$		
		ratio	1/10	1/5	1/2.33	1	2.33	5	10		
Physical parameter	Unit	Screened values									
Dispersion coefficient d_{disp}^c	$\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ mm at each event	0	10^{-6}	10^{-5}	$5.01 \cdot 10^{-5}$	$1.78 \cdot 10^{-4}$	$5.01 \cdot 10^{-4}$	$1.26 \cdot 10^{-3}$	$3.47 \cdot 10^{-3}$	$9.94 \cdot 10^{-3}$	∞
		0	0.28	0.91	5	3.85	6.46	10.2	17.0	25.7	∞
		0	9	3	2.04	3.85	6.46	10.2	17.0	25.7	∞

^a The half-saturation constant κ corresponded to κ_M for the Monod-based model and $B(t=0) \cdot \kappa_C$ for the Contois-based model (where $B(t=0)$ is the value from the hydrostatic experiments).

^b Values of $B(t=0)$ were set individually in each experiment according to the initial *tfdA* gene abundance differences measured in experiments, as the number of *tfdA* copies per volume of water was 1.6 times smaller in the percolation experiments ($0.0432 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$) than in the hydrostatic experiments ($0.0692 \cdot 10^9 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$).

^c The effective dispersion coefficient d_{disp} applied only to heterogeneous percolation experiments. Length values below in mm corresponds to the equivalent root mean squared spreading of bacteria and substrate by each irrigation event.

S.3. Transport model

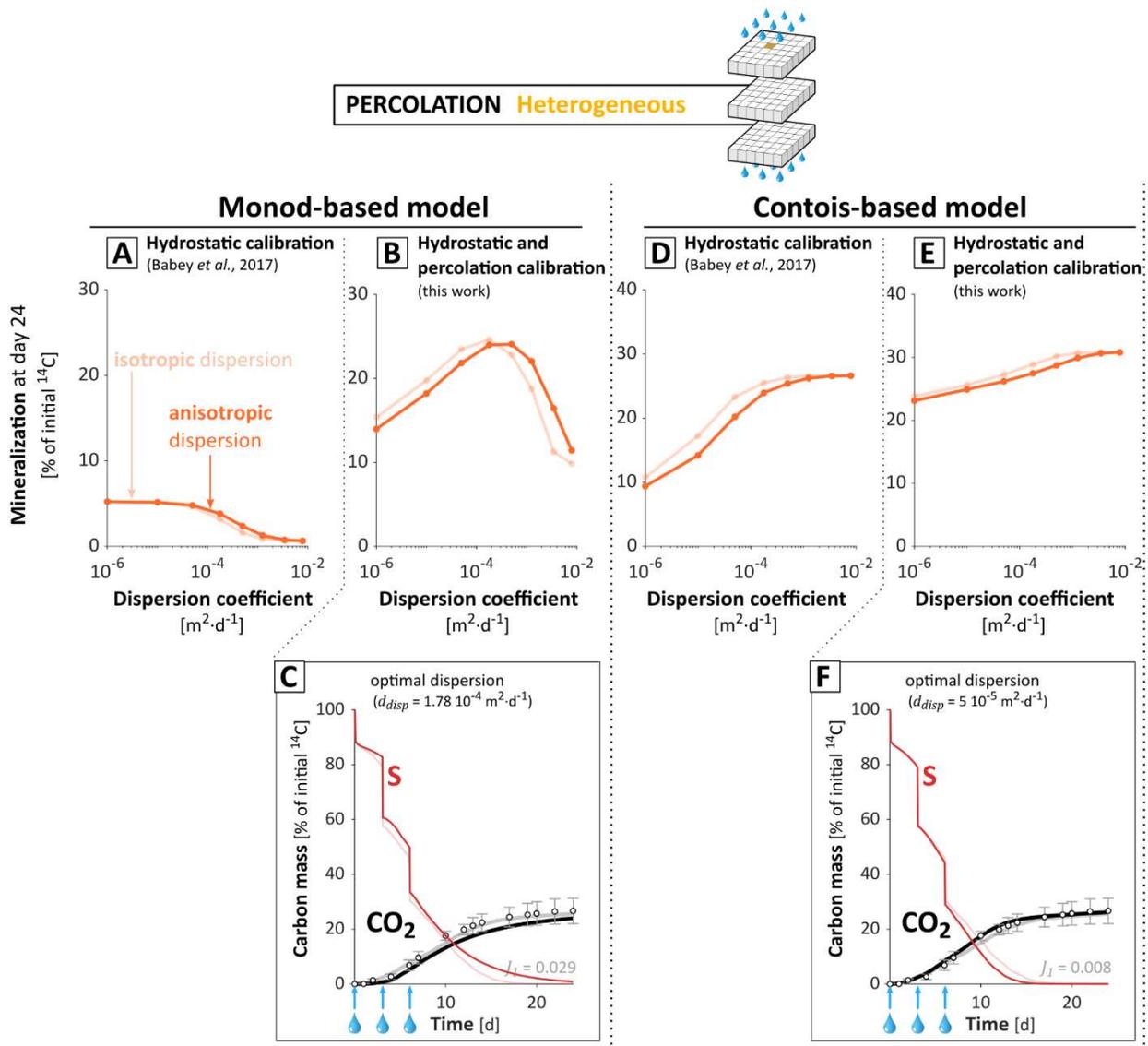


Fig. S3. Impact of dispersion anisotropy. (A-B-C) refer to the Monod model and (D-E-F) refer to the Contois model. Figures at the top (A, B, D, E) represent the mineralization predicted at day 24 as a function of the dispersion coefficient d_{disp} , depending on the anisotropy of dispersion. Figures at the bottom (C, F) show the mineralization dynamics predicted in the heterogeneous percolation experiment. Results obtained with an anisotropic dispersion coefficient are indicated as the main lines, while results obtained with an isotropic dispersion are indicated in transparency (pale lines). The ratio of longitudinal dispersion coefficient $d_{disp, L}$ over transverse dispersion coefficient $d_{disp, T}$ considered in the anisotropic dispersion was equal to 10 as an admissible maximum boundary (Bijeljic and Blunt, 2007). The anisotropic dispersion coefficients were chosen in relation with the

effective isotropic dispersion coefficient d_{disp} such as $\frac{1}{3}d_{disp,L} + \frac{2}{3}d_{disp,T} = d_{disp}$. For representation and legend, see **Fig. 3**.

The anisotropy of dispersion slightly shifted the optimal dispersion towards greater values, but this effect was limited. The mineralization dynamics remained similar, and a better fit was even obtained for the best-fitting parameter set under the Contois model.

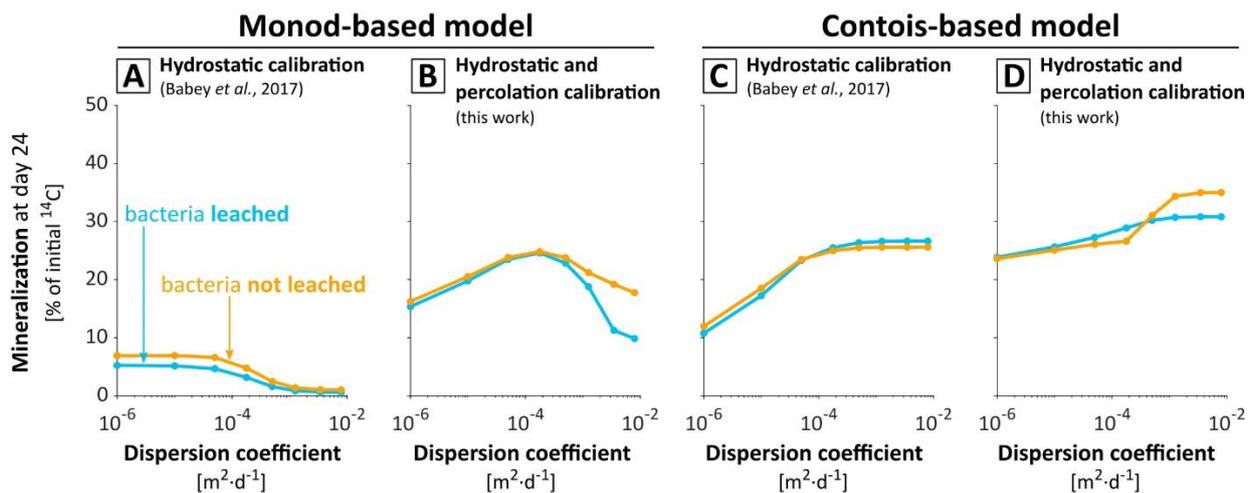


Fig. S4. Impact of dispersion on mineralization predicted at day 24, depending on the scenario of bacteria leaching. During the percolation events, bacteria were either leached at the same rate as the substrate (blue lines) or not leached (orange lines). The panels represent the relation between the dispersion coefficient d_{disp} and the final mineralization for the hydrostatic Monod calibration (Babey et al., 2017) applied to the Monod-based (A) and the Contois-based (C) models, and for the two parameterizations calibrated in this work on both hydrostatic and percolation experiments under Monod-based (B) and Contois-based (D) models. The parameterizations calibrated under the Monod-based and the Contois-based models are described respectively in sections 3.1 and 3.3, and parameter values are given in **table 2**. As illustrated here, bacteria leaching did not affect the existence of an optimal dispersion for bacteria and its dependence on the maximum uptake efficiency.

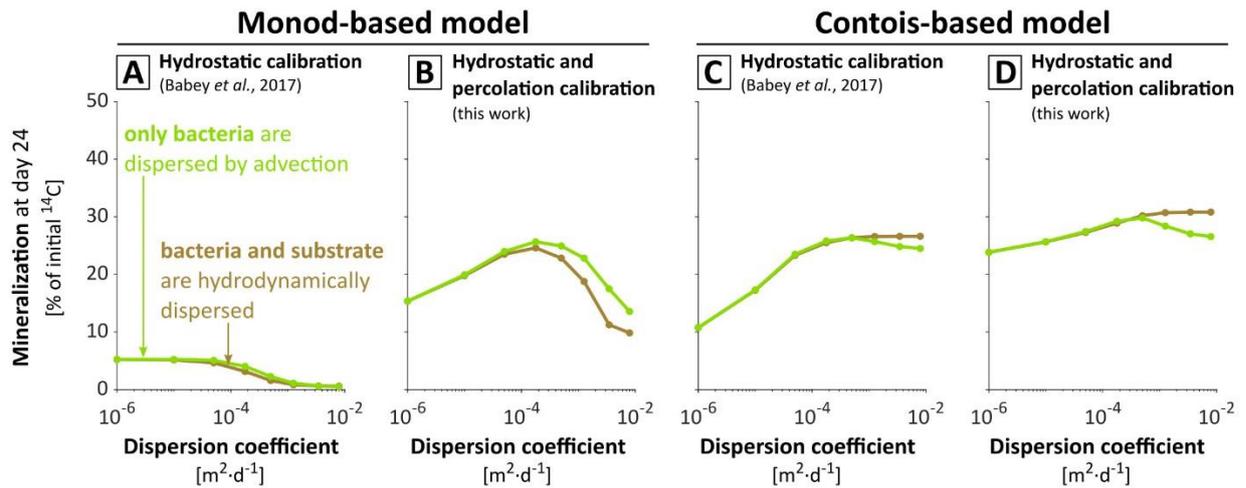


Fig. S5. Impact of dispersion on mineralization predicted at day 24, with or without hydrodynamic dispersion of substrate. During the percolation events, either both substrate and bacteria were hydrodynamically dispersed (brown lines) or only bacteria were dispersed (green lines). Panels represent the relation between the dispersion coefficient d_{disp} and the final mineralization for the hydrostatic Monod calibration (Babey et al., 2017) applied to the Monod-based (A) and the Contois-based (C) models, and for the two parameterizations calibrated in this work on both hydrostatic and percolation experiments under the Monod-based (B) and the Contois-based (D) models. The parameterizations calibrated under the Monod-based and Contois-based models are described respectively in sections 3.1 and 3.3, and parameter values are given in **table 2**. As illustrated here, hydrodynamic substrate dispersion did not affect the existence of an optimal dispersion for bacteria and its dependence on the maximum uptake efficiency.

S.4. Supplementary results

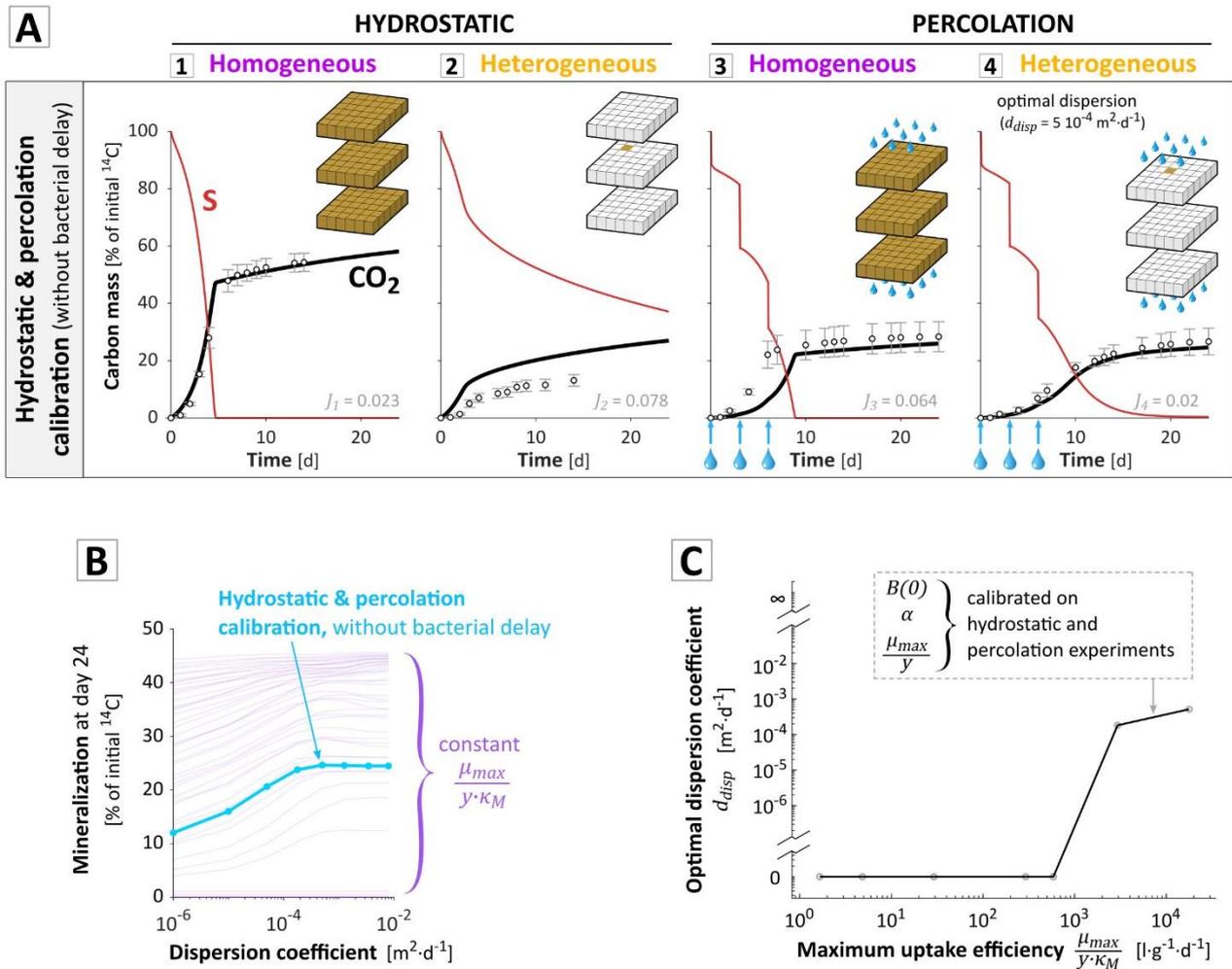


Fig. S6. Main modeling results without the explicit bacterial accommodation rate α based on Patarinska et al. (2000). This accommodation function induces a permanent delay in the observed specific growth rate μ , which tends towards its value derived from the Monod relation, following a concave relation whose half-life is given by α . For representation and legend, see Fig. 3, 4 and 6.

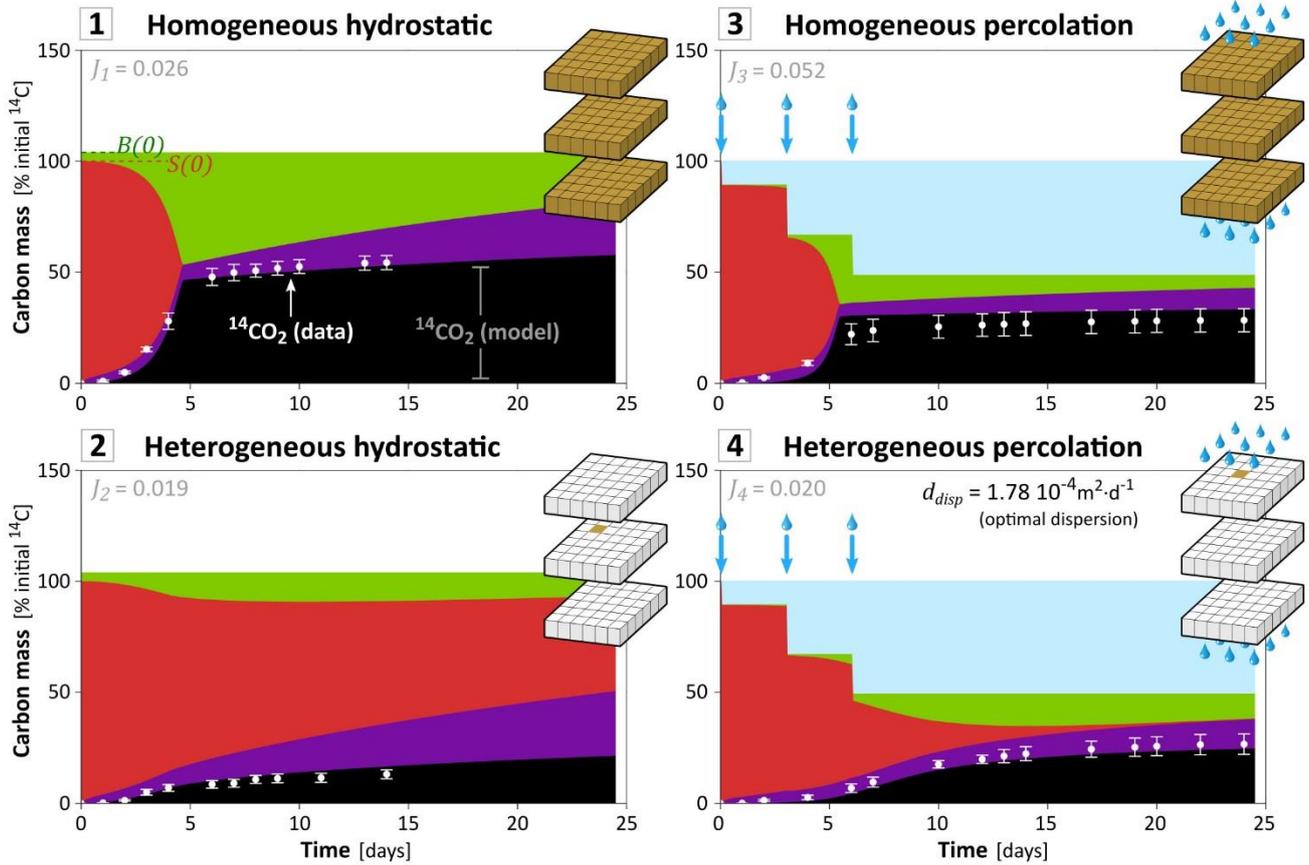
As discussed in Babey et al. (2017), the inclusion of a delay function in the expression of the bacterial activity was necessary to adequately fit the experimental data of Pinheiro et al. (2015). Nevertheless, the case $\alpha = 934.1 \text{ d}^{-1}$, which corresponds to a negligible lag phase of 1min30sec, has been included in the screening design. The comparison of those sets with all the sets shows that the parameterization best predicting the data displays a maximum uptake efficiency six times higher, an optimal dispersion coefficient three times higher, and a maximum uptake rate eight times lower. This best-fitting parameter sets predicts well the hydrostatic homogeneous and percolation heterogeneous experiments, but fails to capture the initial dynamics of the two other experiments, for a global discrepancy 1.6 times larger. As shown by the initial dynamics of the mineralization curves, it was possible to reproduce the progressive start of the mineralization without any delay

parameter, due to the multiplication of a small initial bacterial population, but it became impossible to find a parameter set in adequacy with all the experimental data.

In regards to the model complexity, it is important to note that, aside from the fact that sorption, bacterial delay and nutrient recycling processes were necessary to adequately fit the experimental data, they did not interfere with the numerical justifications of the following concepts:

- Existence of an optimal bacterial dispersion resulting from a balance between substrate dilution and bacterial density
- Dependence of the optimal dispersion coefficient upon the maximum uptake efficiency
- Significance of the regulation of mineralization by density under low bacterial population densities and high maximum uptake efficiencies commonly found in bulk soil

A Monod-based model



B Contois-based model

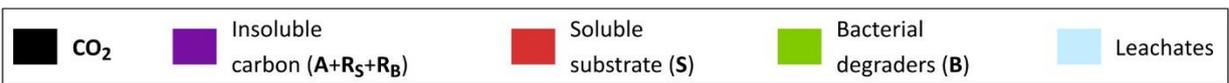
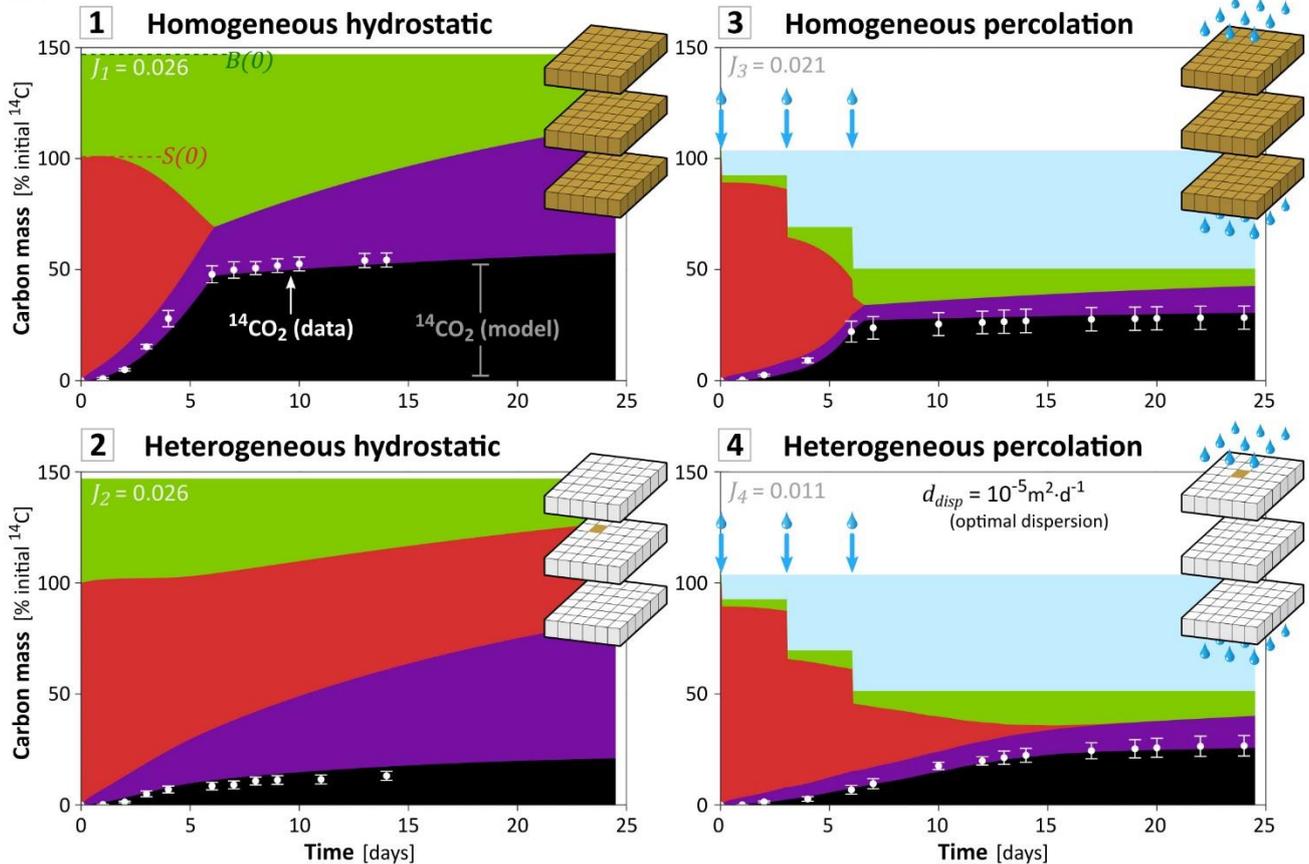


Fig. S7. Carbon mass balance for the Monod-based (A) and the Contois-based (B) models calibrated on both hydrostatic and percolation experiments. The different experiments are recalled above each of the graphs and sketched next to them according to Fig. 1C. Colors represent the repartition of carbon mass within the four pools described in Fig. 2 over the whole soil column, normalized by the initial carbon mass of substrate. The initial substrate ^{14}C -2,4-D (red curve, S) is eventually mineralized to $^{14}\text{CO}_2$ (black curve), incorporated by the bacterial degraders into their biomass (green curve, B) or transferred to insoluble pools (purple curve) as residues sorbed to the soil particles or residues from dead ^{14}C -bacterial degraders. When the soluble substrate vanishes after some days in [1], [3] and [4], mineralization still occurs but at a much slower rate as it is fueled by nutrient recycling, a feature well captured by the model (Babey et al., 2017). The blue curve refer to the carbon leached at each percolation event (blue arrows) from the soluble substrate and the bacteria. Experimental values and standard deviations of $^{14}\text{CO}_2$ production are represented in white. Agreement between experiments and model can be visually assessed by the proximity of the white line to the black area, and the discrepancy J_q between experimental and simulated $^{14}\text{CO}_2$ values for each experiment (Eq. (15)) is displayed on top of each graph.

Monod-based model

Contois-based model

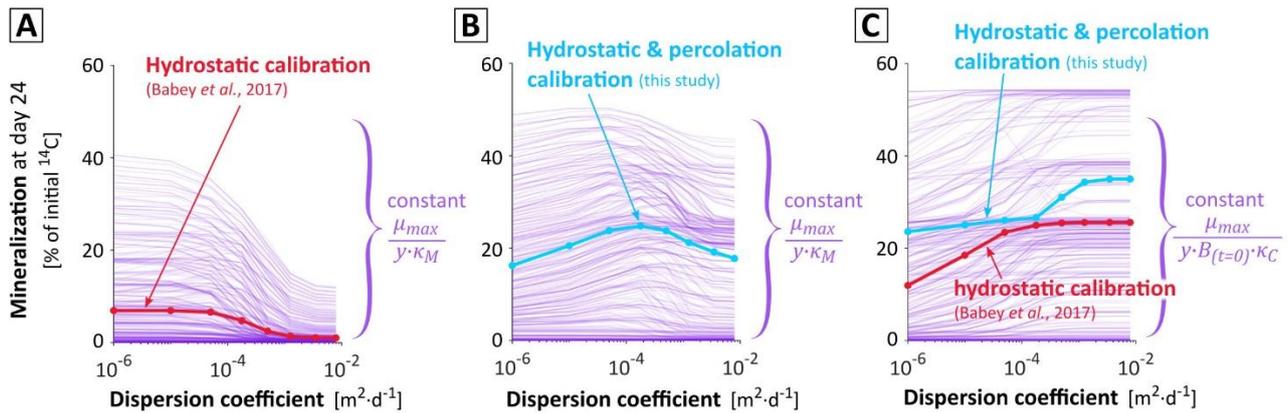


Fig. S8. Influence of the dispersion coefficient d_{disp} on mineralization predicted at day 24 $m_{CO_2}(t=24)$ for the biological parameter sets calibrated on the sole hydrostatic experiments under the Monod model (A, thick red line) and the Contois model (C, thick red line), and calibrated on both hydrostatic and percolation experiments under the Monod model (B, thick blue line) and the Contois model (C, thick blue line). The thin mauve lines correspond to parameter sets with the same specific maximum uptake efficiency, either $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ or $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_C B(t=0)$ for Monod or Contois model respectively, but different maximum specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu_{max}$, accommodation rate α and initial bacterial population density $B(t=0)$. The maximum uptake efficiency is the main determinant of the dispersion leading to the highest final mineralization (see section 3.2.3) while the other biological parameters determine the corresponding mineralization level.

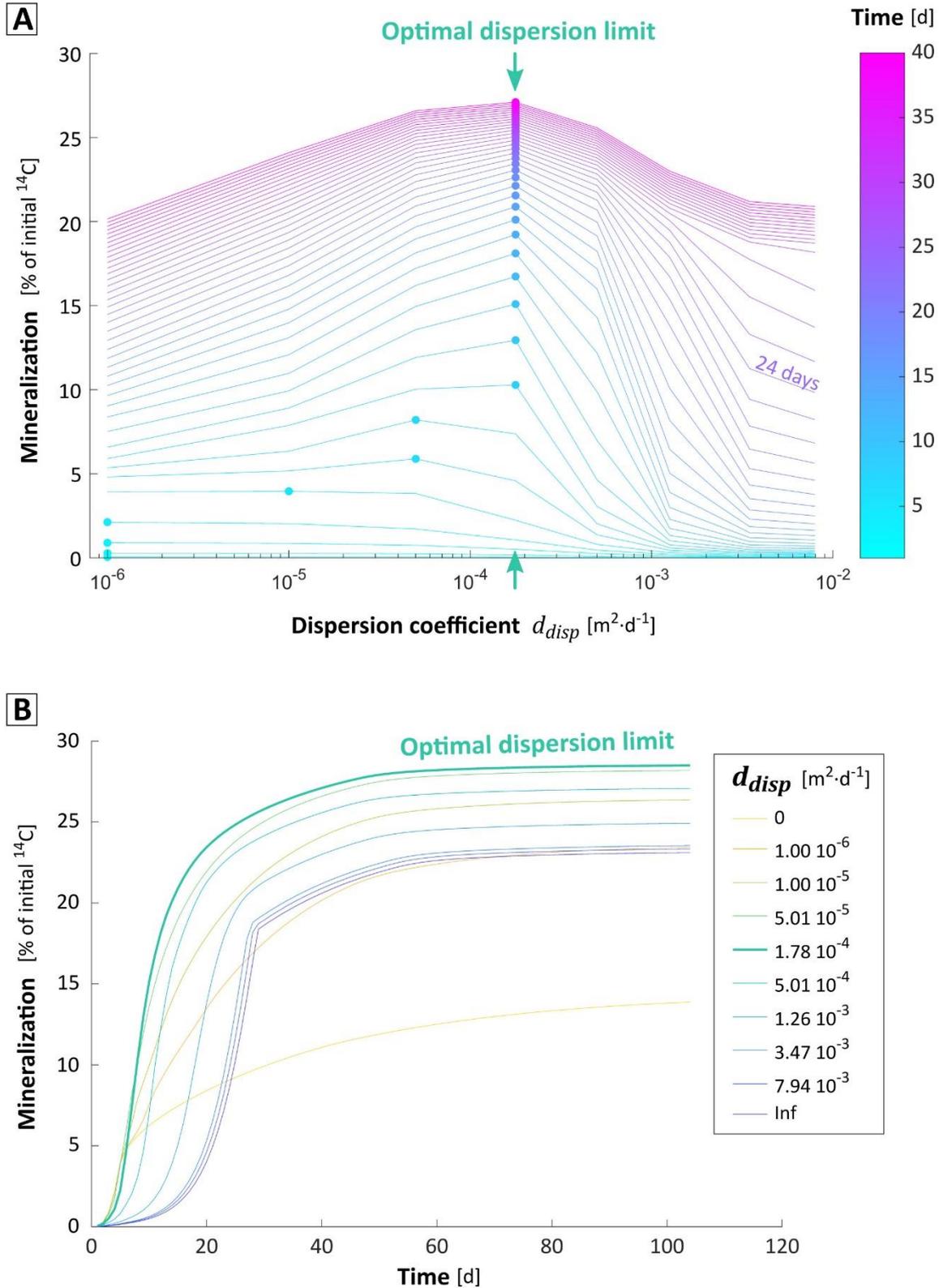
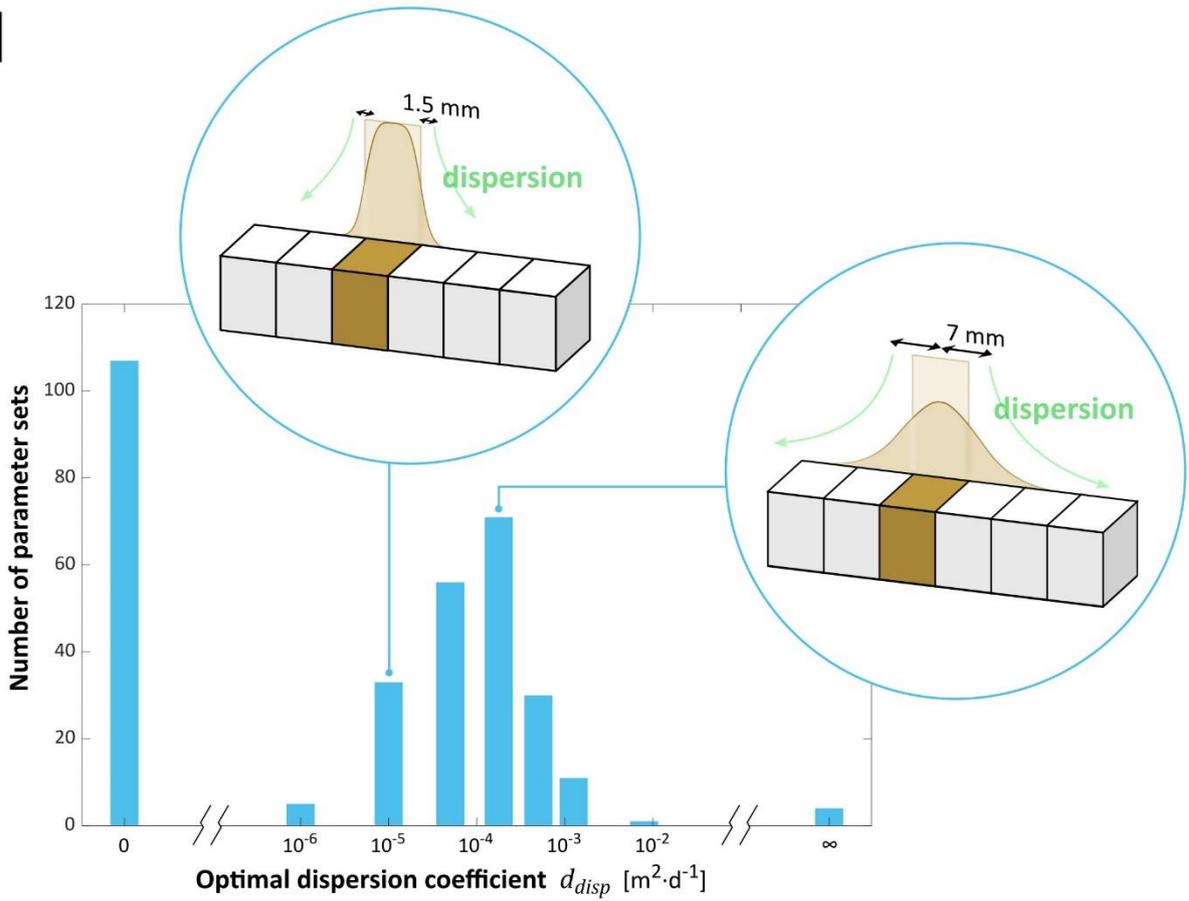


Fig. S9. Convergence of optimal bacterial spreading with time. **(A)** Daily mineralization values depending on bacteria dispersion coefficients d_{disp} , for the parameter set calibrated under Monod model on both hydrostatic and percolation experiments. For each day represented by the color scale, the optimal dispersion is indicated with a dot. **(B)** Dynamics of mineralization for each d_{disp} .

The bacterial spreading for maximum degradation varies with time as spatial distributions of bacteria and substrate are dynamic. Diffusion and dispersion steadily smoothen heterogeneities, while bacteria growth and consumption tend to increase them. During the first days, increasing dispersion decreases degradation initial velocity but makes it possible to eventually reach a higher mineralization by delaying the onset of competition for substrate. Nevertheless, this effect vanishes after 4-7 days and increasing dispersion only decreases mineralization. The optimal bacterial dispersion thus tends towards a finite limit of $1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$. The optimal dispersion converges as time increases because bacterial growth and consumption are limited in the analyzed experiment by the initial substrate quantity, and because of persistent sorption, carbon stabilization and bacterial decaying favoring quick kinetics.

A



B

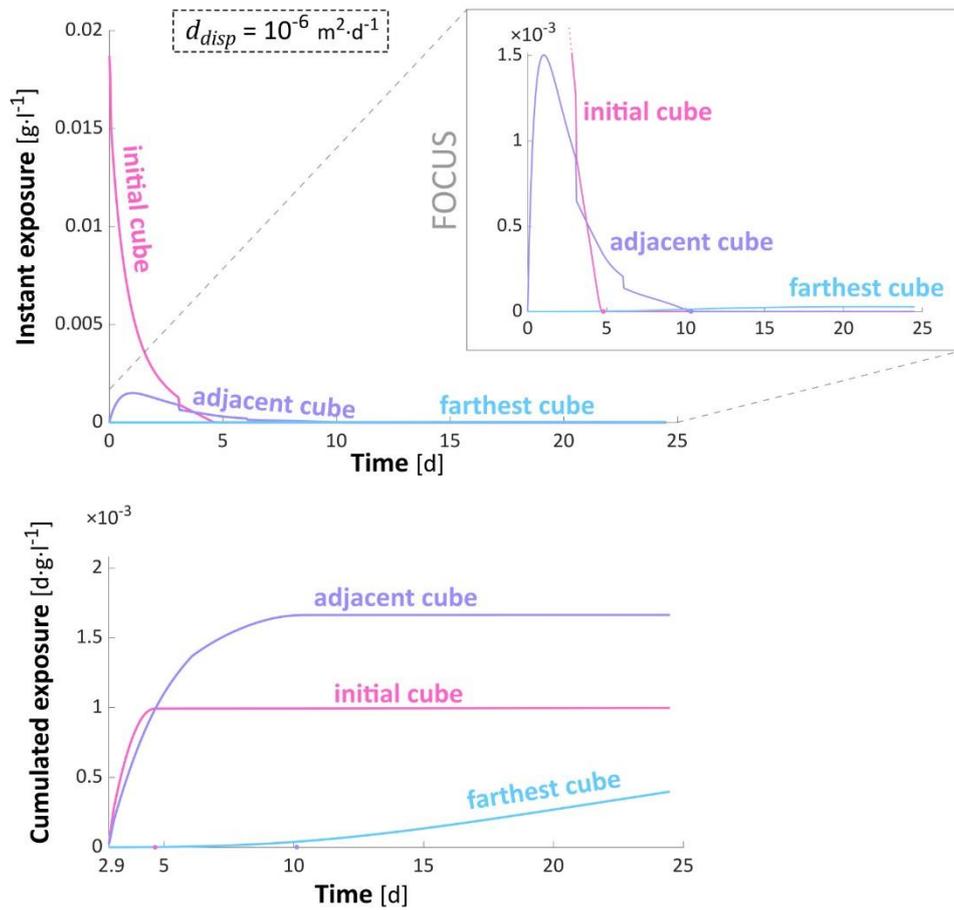


Fig. S10. Relevance of bacterial spreading. **(A)** Bar-plot distribution of dispersion coefficients leading to the highest mineralization. The parameter sets considered are the 318 biological parameter sets leading to the best adequacy with data on all experiments except the heterogeneous percolation experiment ($J_{123} < 0.1$). For each of these parameter sets, the dispersion coefficient d_{disp} leading to the best adequacy with data on the percolation experiment is determined, and its distribution is bar-plotted in this graph. Apart from the absence of dispersion ($d_{disp} = 0$), optimal dispersion coefficients roughly follow a lognormal distribution, showing that extremely low and high dispersions are suboptimal. The large number of models without dispersion ($d_{disp} = 0$) likely accounts for all the potential bacterial spreading values equal and inferior to the initial bacterial spreading (one cube) and not individually tested in the screening. Yet, more than 45% of the optimal dispersion coefficients are lower or equal to $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$, which corresponds to a root-mean-square displacement less than 1 mm, highlighting that bacterial significant spreading is detrimental for half of the screened biological parameter sets. Bacterial spreading can strongly decrease the performance even in our semi-closed system without any loss of substrate by diffusion in the environment. **(B)** Simulated instant and cumulated exposure to substrate concentration in the cube initially amended with substrate (mauve lines), in one of its adjacent cubes (pink lines) and in a cube 36 mm away (blue lines), under the Monod-based model with the biological parameters calibrated on both hydrostatic and percolation experiments and a low dispersion ($d_{disp} = 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$). Concentration exposures are expressed in mass of 2,4-D per volume of water. The substrate concentration in the initial cube reaches zero after 4.8 days, and after 10 days in the adjacent cube. In addition, due to accommodation time ($1/\alpha = 11 \text{ d}$) and due to the time necessary for bacterial growth, degradation is small at early times. 95% of the final mineralization occurs after 2 d and 21 h. Therefore, cumulated exposure is represented starting from this date ($t = 2.75 \text{ d}$), and shows that, for this high-degradation period, the location with the highest cumulated exposure is the adjacent cube.

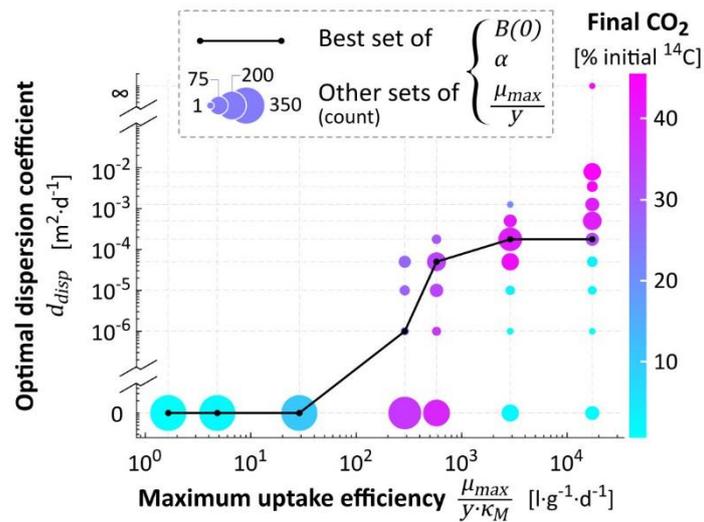


Fig. S11. Impact of maximum uptake efficiency on the dispersion coefficient giving the highest mineralization at day 24 for the heterogeneous percolation experiment. As illustrated for the calibrated biological parameterization (black line), the optimal dispersion increases with the maximum uptake efficiency. It is a general feature to all parameterizations. Color scale visually assesses the level of mineralization. With maximum uptake efficiencies below or equal to 28.9 l·g⁻¹·d⁻¹, mineralization is low no matter the dispersion, even with the highest maximum specific uptake rate $(1/y) \cdot \mu_{max}$, the highest initial biomass $B(t=0)$ and without any accommodation delay α . After 24 days, it still remains at least 27% of the non-leached initial solute $S(t=0)$ in the soil column, versus less than 1% with a maximum uptake efficiency ten times higher. Indeed, with maximum uptake efficiencies of 289 l·g⁻¹·d⁻¹ or higher, mineralization can reach much higher values. Pink dots highlight that mineralization tend to increase when the maximum uptake efficiency and the corresponding optimal dispersion coefficient both increase.

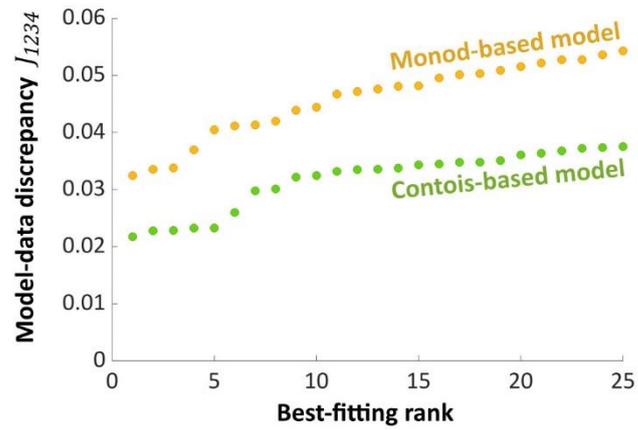


Fig. S12. Overall discrepancy J_{1234} (Eq. (15)) between simulations and experiments for the 25 parameter sets leading to the best adequacy with data, under Monod-based model (substrate-dependence, in orange) and Contois-based model (ratio-dependence, in green).

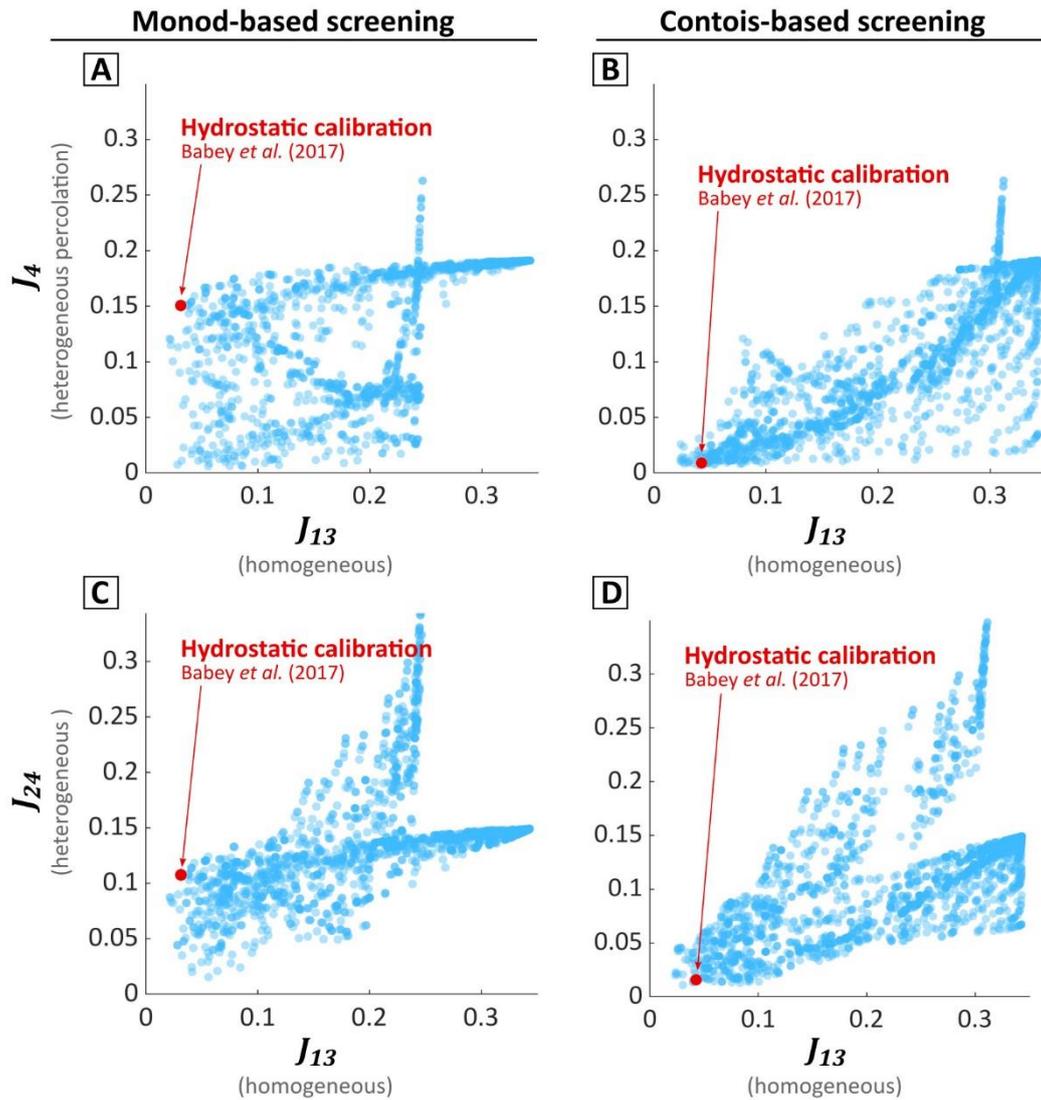


Fig. S13. Predictive capacities of Monod-based (A, C) and Contois-based (B, D) models for aggregated and dispersive conditions. Each dot refers to a set of biological parameters. d_{disp} is chosen for each of the biological parameter set as the dispersion coefficient giving the lowest discrepancy with data. The red dot represents the set calibrated on the sole hydrostatic experiments. The blue dots refer to the other parameter sets. The large vertical dispersion of blue dots on the figures (A) and (C), even for X-values approaching zero, shows that, with Monod-based model, a good agreement of the model with the homogeneous experiments does not guarantee predictive capacities for the heterogeneous experiments. Conversely, a good agreement with the heterogeneous experiments does not guarantee a good performance on the other experiments. On the contrary, with the Contois-based model, a good agreement of the model with the homogeneous experiments guarantees better predictive capacities for the heterogeneous experiments.

S.5. Theoretical collision frequency between bacteria and solute substrate

The equation of Smoluchowski (1918) for the aggregation of colloids can be used to calculate the collision frequency between bacteria and their substrate in solution, considering both as spherical particles. The frequency of encounter between one bacterium and its substrate is:

$$-\frac{dv_S}{dt} = 4\pi(r_S + r_B)(D_S + D_B) \left[1 + \frac{r_S + r_B}{\sqrt{\pi(D_S + D_B)t}} \right] v_S v_B$$

where $_S$ and $_B$ indices refer to substrate and bacteria respectively, v are the number densities, D the molecular diffusion coefficients in water and r the radii.

For $D_S \gg D_B$, $r_B \gg r_S$ and $t > 10^{-3}s$, the equation simplifies to the equation (11) of Smoluchowski:

$$-\frac{dv_S}{dt} = 4\pi r_B D_S v_S v_B$$

This collision frequency for each bacteria can be converted with a change of units as a time differential equation of substrate concentration per gram of bacteria, as:

$$-\frac{dS}{dt} = 4\pi r_B D_S S B = u_{max} S B$$

where u_{max} is the theoretical collisional limit for the maximum uptake efficiency $(1/y) \cdot \mu_{max}/KM$ (Koch, 1971; Abbott and Nelsestuen, 1988).

With D_S taken equal to $6.9 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ (Saxena et al., 1974) and r_B estimated at $0.75 \text{ } \mu\text{m}$ assuming a bacterial volume-weight ratio of $6.22 \cdot 10^6 \text{ } \mu\text{m}^3 \cdot \mu\text{g}^{-1}$ (Balkwill et al., 1988), $u_{max} = 6.50 \cdot 10^{-7} \text{ l} \cdot \text{d}^{-1}$ (volume of water per bacterial cell per unit of time), which is 135 times higher than the largest maximum uptake efficiency tested in the screening ($4.85 \cdot 10^{-9} \text{ l} \cdot \text{d}^{-1}$). With a change of units, estimating m_B the average mass of a single 2,4-D degrader = $2.8 \cdot 10^{-13} \text{ g}$ (Dechesne et al., 2010), the maximum uptake efficiency values is $u_{max} = 2.13 \cdot 10^4 \text{ g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (mass of dry soil per mass of bacterial carbon per unit of time) = $2.32 \cdot 10^6 \text{ l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ (volume of water per mass of bacteria per unit of time). This theoretical limit is similar to the theoretical value of $7.68 \cdot 10^6 \text{ l} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ assumed by Button (1993) for a marine ultramicrobacteria.

Note that the normalizing bacterial units (bacterial cell, bacterial mass, bacterial carbon mass) depend finely on surface-volume ratio of bacteria and thus on their diameter.

References

- Abbott, A.J., Nelsestuen, G.L., 1988. The collisional limit: an important consideration for membrane-associated enzymes and receptors. *The FASEB Journal* 2, 2858–2866. doi:10.1096/fasebj.2.13.2844615
- Babey, T., Vieublé Gonod, L., Rapaport, A., Pinheiro, M., Garnier, P., de Dreuzy, J.-R., 2017. Spatiotemporal simulations of 2,4-D pesticide degradation by microorganisms in 3D soil-core experiments. *Ecological Modelling* 344, 48–61. doi:10.1016/j.ecolmodel.2016.11.006
- Bælum, J., Henriksen, T., Hansen, H.C.B., Jacobsen, C.S., 2006. Degradation of 4-Chloro-2-Methylphenoxyacetic Acid in Top- and Subsoil Is Quantitatively Linked to the Class III *tfdA* Gene. *Applied and Environmental Microbiology* 72, 1476–1486. doi:10.1128/AEM.72.2.1476–1486.2006
- Bælum, J., Nicolaisen, M.H., Holben, W.E., Strobel, B.W., Sørensen, J., Jacobsen, C.S., 2008. Direct analysis of *tfdA* gene expression by indigenous bacteria in phenoxy acid amended agricultural soil. *The ISME Journal* 2, 677–687. doi:10.1038/ismej.2008.21
- Balkwill, D.L., Leach, F.R., Wilson, J.T., McNabb, J.F., White, D.C., 1988. Equivalence of microbial biomass measures based on membrane lipid and cell wall components, adenosine triphosphate, and direct counts in subsurface aquifer sediments. *Microbial Ecology* 16, 73–84. doi:10.1007/BF02097406
- Bijeljic, B., Blunt, M.J., 2007. Pore-scale modeling of transverse dispersion in porous media: PORE-SCALE MODELING OF TRANSVERSE DISPERSION. *Water Resources Research* 43. doi:10.1029/2006WR005700
- Button, D.K., 1993. Nutrient-limited microbial growth kinetics: overview and recent advances. *Antonie van Leeuwenhoek* 63, 225–235. doi:10.1007/BF00871220
- Dechesne, A., Owsianiak, M., Bazire, A., Grundmann, G.L., Binning, P.J., Smets, B.F., 2010. Biodegradation in a Partially Saturated Sand Matrix: Compounding Effects of Water Content, Bacterial Spatial Distribution, and Motility. *Environmental Science & Technology* 44, 2386–2392. doi:10.1021/es902760y
- Koch, A.L., 1971. The Adaptive Responses of *Escherichia coli* to a Feast and Famine Existence, in: *Advances in Microbial Physiology*. Elsevier, pp. 147–217. doi:10.1016/S0065-2911(08)60069-7
- Pinheiro, M., Garnier, P., Beguet, J., Martin Laurent, F., Vieublé Gonod, L., 2015. The millimetre-scale distribution of 2,4-D and its degraders drives the fate of 2,4-D at the soil core scale. *Soil Biology and Biochemistry* 88, 90–100. doi:10.1016/j.soilbio.2015.05.008
- Pinheiro, M., Pagel, H., Poll, C., Ditterich, F., Garnier, P., Streck, T., Kandeler, E., Vieublé Gonod, L., 2018. Water flow drives small scale biogeography of pesticides and bacterial pesticide degraders - A microcosm study using 2,4-D as a model compound. *Soil Biology and Biochemistry* 127, 137–147. doi:10.1016/j.soilbio.2018.09.024

Saxena, S.K., Boersma, L., Lindstrom, F.T., Young, J.L., 1974. The Self-Diffusion Coefficients of ^{45}Ca and 2,4-Dichlorophenoxyacetic Acid. *Soil Science* 117, 14–20. doi:10.1097/00010694-197401000-00002

Smoluchowski, M. v, 1918. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 92U, 129–168. doi:<https://doi.org/10.1515/zpch-1918-9209>

III.1.4. Compléments sur les traits d'histoire de vie

Les « traits d'histoire de vie » (*life-history traits*) sont les traits biologiques qui déterminent comment l'énergie et la matière consommées par un organisme vivant vont être allouées à la multiplication, à la croissance et à la survie de l'individu. Ces traits caractérisent la stratégie multiplicative de l'espèce ou de la population, et au final son degré d'adaptation à son environnement, en mettant en valeur les compromis (*trade-off*) qui apparaissent nécessairement entre ces différents traits. Appliqué aux bactéries du sol, ce terme regroupe généralement la vitesse spécifique maximale de croissance, l'affinité pour chaque substrat, la diversité des substrats assimilables par la bactérie, la durée de la phase de latence, les caractéristiques de dormance, de maintenance, de motilité, et d'autres paramètres caractérisant les relations avec les autres populations microbiennes et avec l'environnement. Dans l'article, le trait d'efficacité spécifique maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$ joue un rôle central. Certains travaux (Button, 1991) ont proposé d'utiliser l'efficacité maximale d'absorption pour classer les bactéries au sein du continuum oligotrophes-copiotrophes, ce dernier décrivant l'adaptation des bactéries aux milieux peu concentrés (respectivement très concentrés) en substrat (Koch, 2001). Le continuum oligotrophes-copiotrophes a été également mis en parallèle avec les stratégies écologiques *r* et *K* (voir Encart 1) (Langer et al., 2004; Tecon and Or, 2017). De plus en plus d'études montrent que ce type de classification écologique offre un cadre de compréhension pertinent pour étudier l'activité des microorganismes du sol (Pagel et al., 2020; Barnett et al., 2021).

III.1.4.1. Description des deux modèles calibrés

Les traits d'histoire de vie des deux modèles calibrés sont représentés dans la **Figure III.1** pour le modèle de Monod, et dans la **Figure III.2** pour le modèle de Contois. Il est souvent considéré que la forte efficacité maximale d'absorption est contrebalancée par une vitesse maximale d'absorption plus faible, un rendement de croissance plus faible, ou une plus grande diversité de substrats utilisables (Fierer et al., 2007). Ici au contraire, le modèle de Monod calibré en hydrostatique et percolation possède à la fois une efficacité maximale d'absorption plus élevée et une vitesse maximale de croissance plus élevée (**Figure III.1A**). Les bactéries modélisées sont ainsi plus rapides à dégrader le substrat à la fois aux basses et aux hautes concentrations. Le compromis se situe sur leur densité initiale qui est plus faible (**Figure III.1B**) et leur vitesse d'accommodation qui est plus lente (**Figure III.1C**), ce qui réduit globalement la vitesse globale de minéralisation pendant les premiers jours. Ces deux types de bactéries ont été catégorisées dans l'article sous les termes d'oligotrophes et de copiotrophes par soucis de simplicité et au regard de leur efficacité maximale d'absorption, qui est l'élément déterminant de la minéralisation. Néanmoins, cette catégorisation reste une simplification qui ne reflète que partiellement la complexité de leurs stratégies écologiques, et dont la définition peut varier entre les études (Langer et al., 2004). La distinction oligotrophe-copiotrophe entre les deux calibrations est plus marquée lorsqu'on compare le modèle calibré en hydrostatique au modèle sans latence qui reproduit

le mieux les données en hydrostatique et percolation (présenté dans la **Fig. S6** de la section III.1.3-S.4). Ce modèle peut être qualifié d'oligotrophe du fait de sa haute efficacité maximale d'absorption (**Figure III.3A**, en bleu), par comparaison avec le modèle calibré en hydrostatique qui, par contre, arbore une densité initiale plus haute (**Figure III.3B**, en orange) qui pourrait par exemple être due à la capacité à utiliser un spectre plus large de substrats.

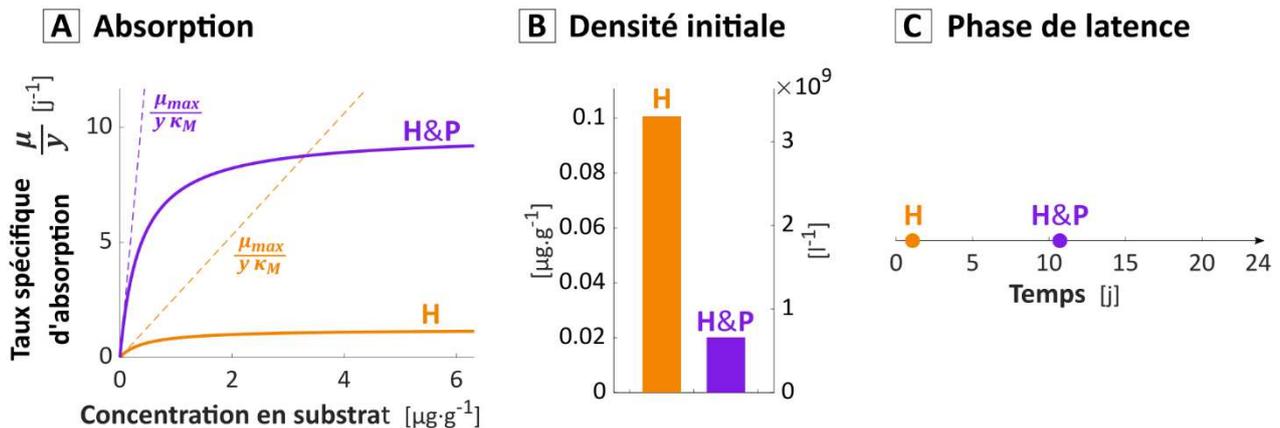


Figure III.1. Traits d'histoire de vie des modèles de Monod calibrés sur les données expérimentales de Pinheiro et al. (2015, 2018). Les paramètres décrivant l'activité métabolique des bactéries μ_{max}/y et $(1/y)\cdot\mu_{max}/\kappa_M$ (A), les densités initiales $B(t=0)$ (B) et la durée de l'accommodation (C), définie comme $1/\alpha$, sont illustrés pour le modèle calibré en hydrostatique seulement (en orange) et le modèle calibré en hydrostatique et percolation (en violet).

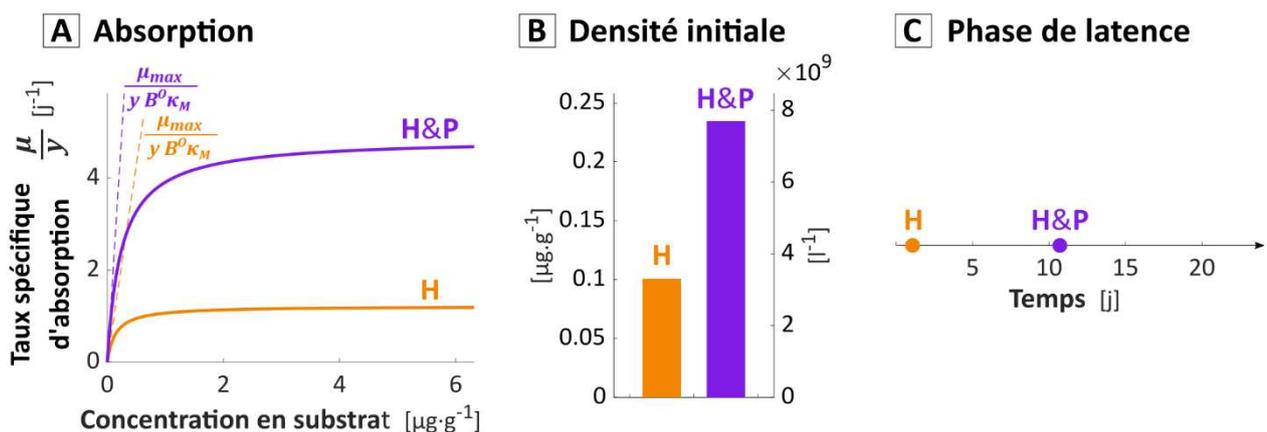


Figure III.2. Traits d'histoire de vie des modèles de Contois calibrés sur les données expérimentales de Pinheiro et al. (2015, 2018). Pour les légendes, se reporter à la figure précédente. Les efficacités maximales d'absorption sont représentées pour une densité bactérienne de référence $B^0 = 5 \cdot 10^{-2} \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (masse de carbone bactérien par masse de sol sec).

La similitude des efficacités maximales d'absorption dans les deux modèles de Contois (**Figure III.2A**) expliquent pourquoi les modèles sont tous les deux en bonne adéquation avec les données expérimentales.

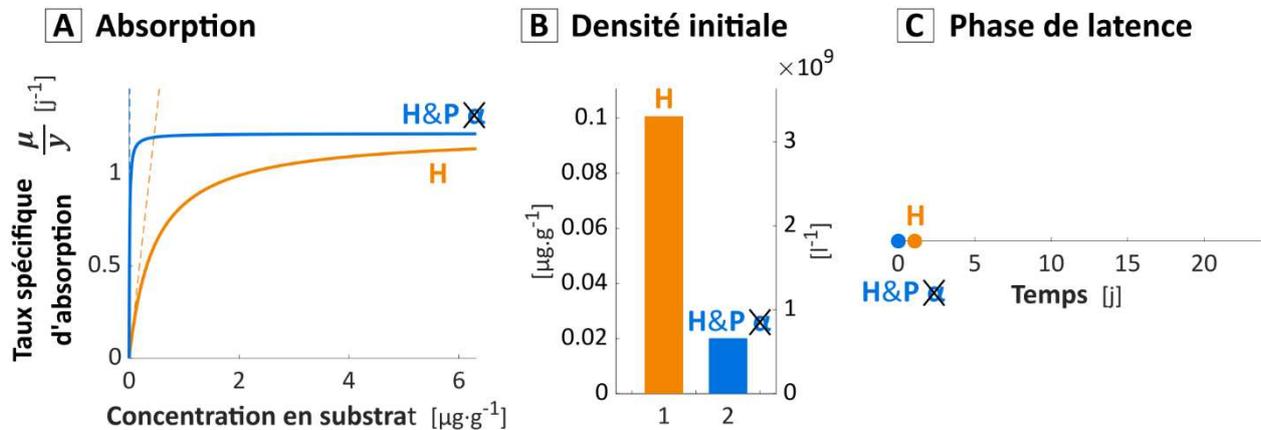


Figure III.3. Traits d'histoire de vie des modèles de Monod calibrés sur les données expérimentales, en hydrostatique (en orange) et en percolation et hydrostatique mais sans latence α (en bleu).

Il est à noter que l'impact du rendement de croissance y n'a pas été évalué dans ce travail. Ce rendement, traduit par la grandeur $-dB/dS$, détermine la fraction du carbone du substrat qui sera incorporée dans la biomasse bactérienne, par opposition à la fraction qui sera minéralisée en CO_2 . Tout le carbone du substrat n'est pas incorporé dans la biomasse, et cela pour des raisons énergétiques (Panikov, 2009). À côté de leurs besoins en matière (anabolisme), les cellules ont besoin d'oxyder leur substrat (catabolisme) afin d'en tirer l'énergie nécessaire à leur fonctionnement. Cette énergie alimente la croissance ainsi que la maintenance de la cellule, c'est-à-dire l'énergie que la cellule doit dépenser pour se maintenir, sans qu'il y ait de croissance. Ce rendement peut diminuer par exemple si la cellule a des besoins importants de maintenance. Néanmoins, dans le système étudié, le rendement est particulièrement étroitement contraint par la proportion finale de CO_2 et de biomasse et résidus biotiques dans la colonne de sol (Babey et al., 2017). Par ailleurs, l'amplitude de variabilité du rendement de croissance est limitée, en comparaison des autres traits tels que l'efficacité maximale d'absorption.

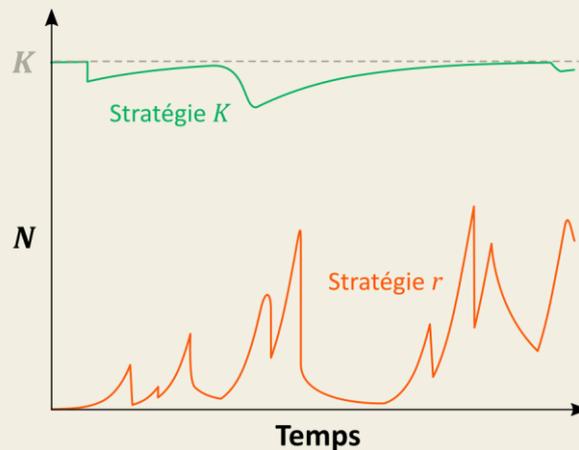
Encart 1. La théorie de sélection « r/K »

Le concept écologique de modèle « r/K », mentionné à plusieurs reprises dans ce travail (section III.1.2-4.1.1, section V.1.1), est basé sur une loi de dynamique de population issue de l'équation du modèle logistique proposée par Verhulst (1838) et s'écrivant comme suit :

$$\frac{dN}{dt} = rN\left(1 - \frac{N}{K}\right) \quad \text{Éq 16}$$

où N est la taille de la population, dN/dt sa dynamique de variation temporelle, r la vitesse spécifique maximale de croissance de la population et K la capacité d'accueil du milieu, c'est-à-dire la taille maximale de population pouvant être supportée par le milieu.

La théorie de sélection « r/K » modélise une relation entre certains traits biologiques, exprimés par la vitesse maximale de croissance r , et la stabilité des conditions environnementales exprimée par la proximité de N avec K (MacArthur and Wilson, 1967; Pianka, 1970). A l'une des extrémités du spectre se trouvent les environnements très **instables**, qualifiés d'environnement « r », dont les fluctuations brutales et imprévisibles **contrôlent la mortalité** des individus, ce qui se traduit par des populations également instables et **peu denses** (c'est-à-dire éloignée de la capacité d'accueil du milieu). Ce premier type de pression sélective favorise les individus avec une **forte vitesse maximale de croissance**, c'est-à-dire capables d'acquérir rapidement les ressources fluctuantes et de se reproduire abondamment, contrebalançant les faibles chances de survie des descendants (stratégie qualifiée de « productive » ou « d'opportuniste »). A l'autre extrémité du spectre se trouvent les environnements très **stables**, qualifiés d'environnements « K », qui abritent des populations également très stables, c'est-à-dire proches de l'équilibre $N = K$. La **forte densité** de population entraîne une raréfaction des ressources et donc une **compétition intra-spécifique** aigue. La mortalité des individus est principalement causée par le ratio défavorable entre le nombre d'individus et la disponibilité des ressources, et la croissance nette est donc **ratio-dépendante**. Ce deuxième type de pression sélective favorise les individus hautement compétitifs, capables d'acquérir et d'utiliser les ressources **efficacement**, au détriment de r (stratégie qualifiée « d'efficace » ou « d'équilibre »).



III.1.4.2. Oligotrophes et copiotrophes modèles

La signification du rôle des paramètres de densité initiale $B(t=0)$ et de vitesse d'accommodation α apparaissent difficiles à saisir, comme cela a été mis en évidence ci-dessus lors de la classification des deux calibrations en termes d'oligotrophie-copiotrophie. En effet, contrairement aux paramètres de vitesse maximale d'absorption μ_{max}/y et d'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ qui sont généralement considérées comme des propriétés intrinsèques aux bactéries, la densité initiale et la vitesse d'accommodation dépendent fortement de l'historique relativement récent de la population bactérienne, ce qui implique une grande variabilité au cours du temps. Ainsi, pour faciliter l'interprétation théorique et la généralisation des résultats, deux sets de paramètres biologiques ont été ajoutés, en complément des deux sets calibrés, afin de représenter deux populations bactériennes copiotrophe et oligotrophe modèles.

Les deux jeux de paramètres sont choisis de manière à avoir un comportement relativement similaire sur les expériences hydrostatiques, idéalement en bonne adéquation avec les données en homogène, mais un comportement divergent sur les expériences en percolation, tant en ayant les mêmes $B(t=0)$ et α . Les paramètres sont représentés sur la **Figure III.4**. La population « oligotrophe » possède une efficacité maximale d'absorption 60× plus forte que la population « copiotrophe », et une vitesse maximale d'absorption 32× plus petite.

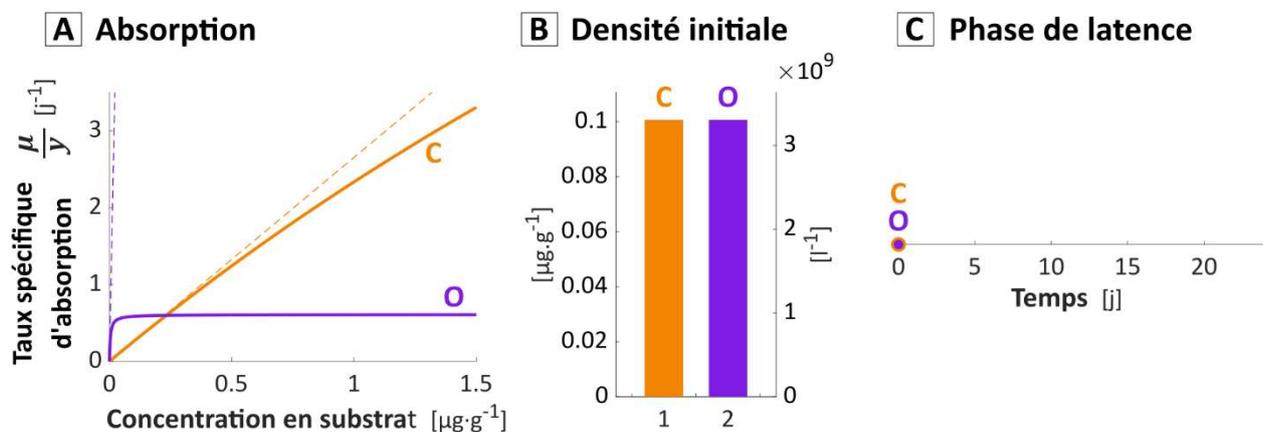


Figure III.4. Traits d'histoire de vie des populations copiotrophes et oligotrophes « modèles » modélisées avec un modèle de Monod. Les paramètres décrivant l'activité métabolique des bactéries μ_{max}/y et $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ (A), les densités initiales $B(t=0)$ (B) et la durée de l'accommodation (C), définie comme $1/\alpha$, sont illustrés pour le modèle représentant des bactéries copiotrophes (en orange) et le modèle représentant des bactéries oligotrophes (en violet).

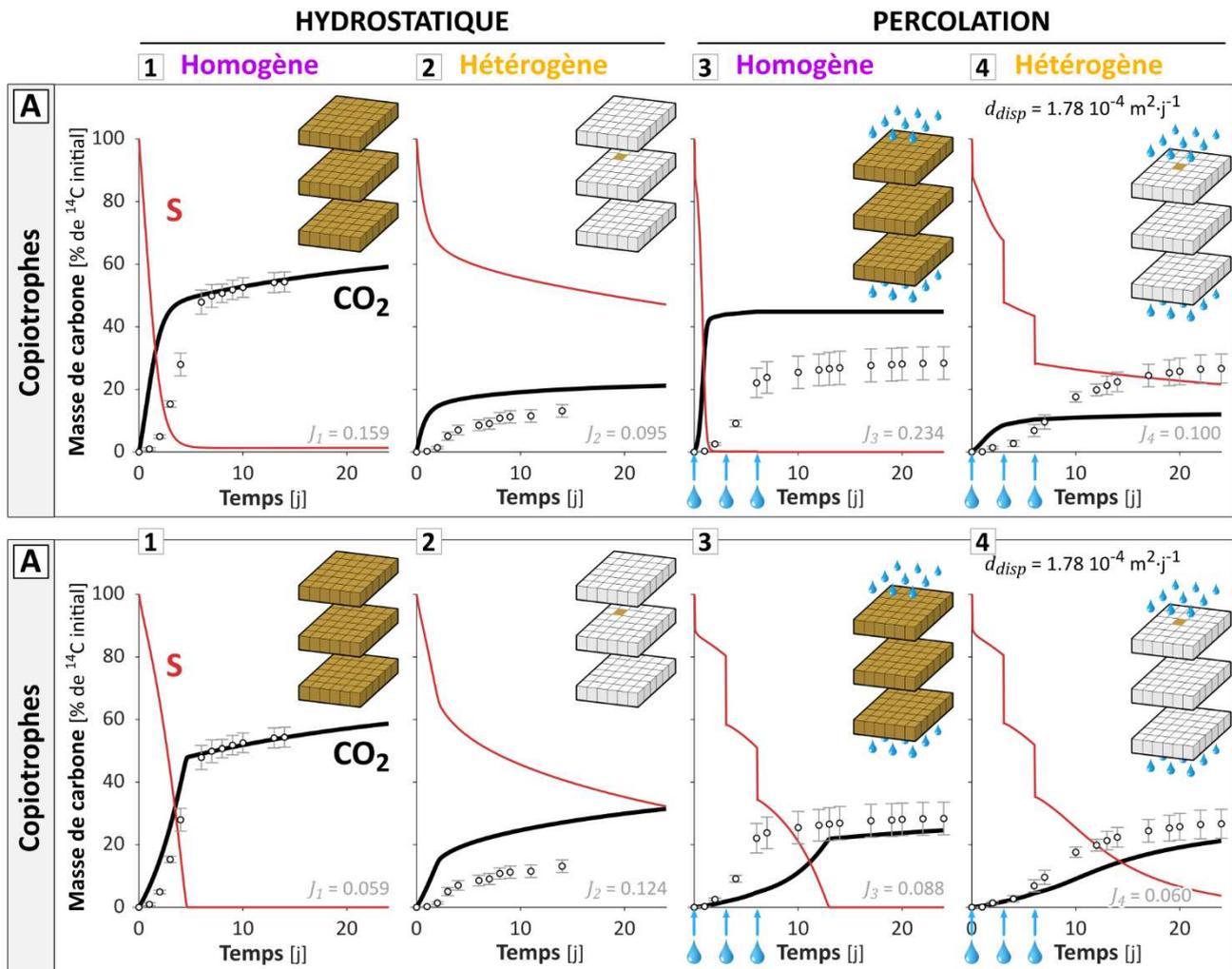


Figure III.5. Dynamiques de minéralisation prédites avec le modèle de Monod pour les jeux de paramètres représentant des bactéries copiotrophes (A) et oligotrophes (B) « modèles ». Les configurations expérimentales correspondantes sont illustrées dans l'angle supérieur droit de chaque graphique. L'adéquation entre les observations et les simulations est indiquée par la valeur de la divergence J en bas des graphiques et peut être évaluée visuellement par la proximité entre la ligne noire et les points, représentant respectivement les résultats du modèle et les données expérimentales. La ligne rouge représente la masse de ^{14}C du substrat restant dans la colonne de sol. Dans les expériences en percolation (A3-4 et B3-4), environ 51% de la masse initiale de ^{14}C a été perdue par lixiviation lors de chaque événement de percolation ($t = 0, 3$ et 6 jours, flèches bleues).

III.1.5. Localisation de la dégradation

Le modèle de transport bioréactif utilisé dans la section III.1.3 permet le suivi spatialisé des flux de carbone au sein de la colonne de sol. Bien qu'il n'y ait pas de données expérimentales pour confronter les résultats simulés, l'étude théorique de la localisation des flux de carbone minéralisés (Figure III.6) et incorporés (Figure III.7) en fonction des différents traits biologiques bactériens permet d'identifier les facteurs limitant de la dégradation.

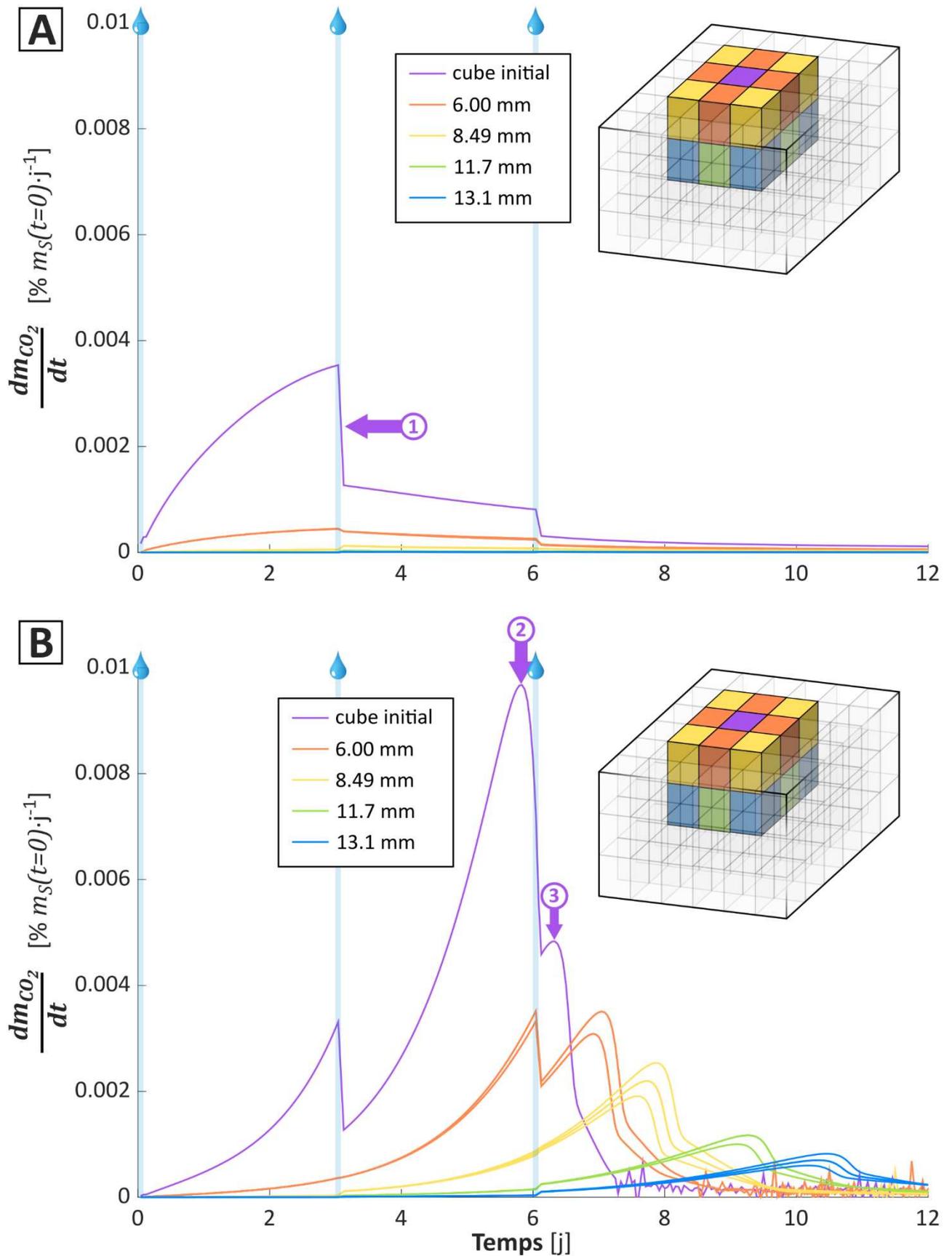


Figure III.6. Localisation des flux de carbone à travers les émissions de CO_2 , pour le modèle de Monod calibré en hydrostatique (A) et pour le modèle de Monod calibré en hydrostatique et percolation (B). Les paramètres biologiques correspondent à leur valeur calibrée, mais le

coefficient de dispersion d_{disp} est choisi identique dans les trois simulations, égal à $1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$ afin de reproduire une dispersion significative et comparable.

La concentration en substrat diminue avec le temps, par diffusion et dispersion hydrodynamique (se référer également à la **Figure II.18**). La position temporelle (précoce/tardive) du pic de minéralisation des bactéries localisées à l'origine renseigne sur la sensibilité des bactéries à la concentration en substrat. Lorsque le pic de minéralisation survient tôt, cela signifie que la concentration en substrat est facilement limitante pour les bactéries considérée, et donc que ces dernières ont une faible efficacité maximale d'absorption. La position temporelle du pic de minéralisation des bactéries dispersées renseigne également sur la même chose.

Pour le modèle calibré sur les expériences hydrostatiques, le pic de minéralisation (**Figure III.6A**, exergue ①) est atteint au moment de la 2^e irrigation, qui s'accompagne, comme chaque irrigation, d'une diminution des concentrations en substrat et des densités bactériennes dans le cube initialement pourvu en bactéries et en substrat. Cette diminution brutale de la concentration en substrat et du nombre de bactéries dans le cube initial entraîne la décroissance de la vitesse de minéralisation, indiquant que la minéralisation est limitée par le nombre de bactéries, et que les bactéries sont limitées par la dilution du substrat perçu par les bactéries lors des épisodes de dispersion des bactéries. Pour la calibration en hydrostatique et percolation, le pic de minéralisation dans le cube initial est atteint avant la 3^e irrigation (**Figure III.6B**, exergue ②), indépendamment de la dispersion hydrodynamique du substrat. Au contraire, l'irrigation entraîne même un sursaut de minéralisation (**Figure III.6B**, exergue ③). Cela peut s'expliquer par le brassage des bactéries causé par la percolation, ramenant dans le cube initial des bactéries plus actives en provenance des cubes voisins. La plus haute activité de ces bactéries indique que la concentration en substrat est plus élevée dans les cubes voisins que dans le cube initial, témoignant d'un épuisement local du substrat dans le cube initial. Par ailleurs,, le pic de minéralisation dans les cubes périphériques apparaît plus tardivement que dans le cube initial. La minéralisation n'est ainsi pas limitée par la dilution du substrat mais par l'épuisement local du substrat dans le cube le plus densément pourvu en bactéries. Pour cette raison, les bactéries des cubes périphériques dans cette calibration hydrostatique et en percolation peuvent connaître une croissance exponentielle (**Figure III.7B**), contrairement à la calibration hydrostatique seule (**Figure III.7A**). Formulé sous l'angle de la croissance exponentielle des bactéries, cela suggère que la croissance exponentielle des bactéries dans le modèle calibré en hydrostatique (**Figure III.7A**) est principalement limitée par la concentration en substrat, qui n'est pas en adéquation (trop faible) vis-à-vis de la faible efficacité maximale d'absorption des bactéries. Au contraire, pour le modèle calibré en hydrostatique et percolation (**Figure III.7B**), la croissance exponentielle des bactéries est principalement limitée par la masse de substrat disponible pour les bactéries. Pour finir, la **Figure III.6** montre que la dégradation par cube est toujours maximale dans le cube de sol

initialement amendé en substrat, peu importe la calibration. Néanmoins, pour la calibration hydrostatique et en percolation, la somme des dégradations par cube dans les cubes périphériques dépasse largement celle du cube initial, ce qui n'est pas le cas avec la calibration hydrostatique.

Ces résultats ne dépendent pas de α ou de $B(t=0)$. Les mêmes observations sont faites sur les jeux de paramètres « oligotrophe/copiotrophe » modèles (section III.1.4.2), pour des α et des $B(t=0)$ identiques (**Figure III.8**).

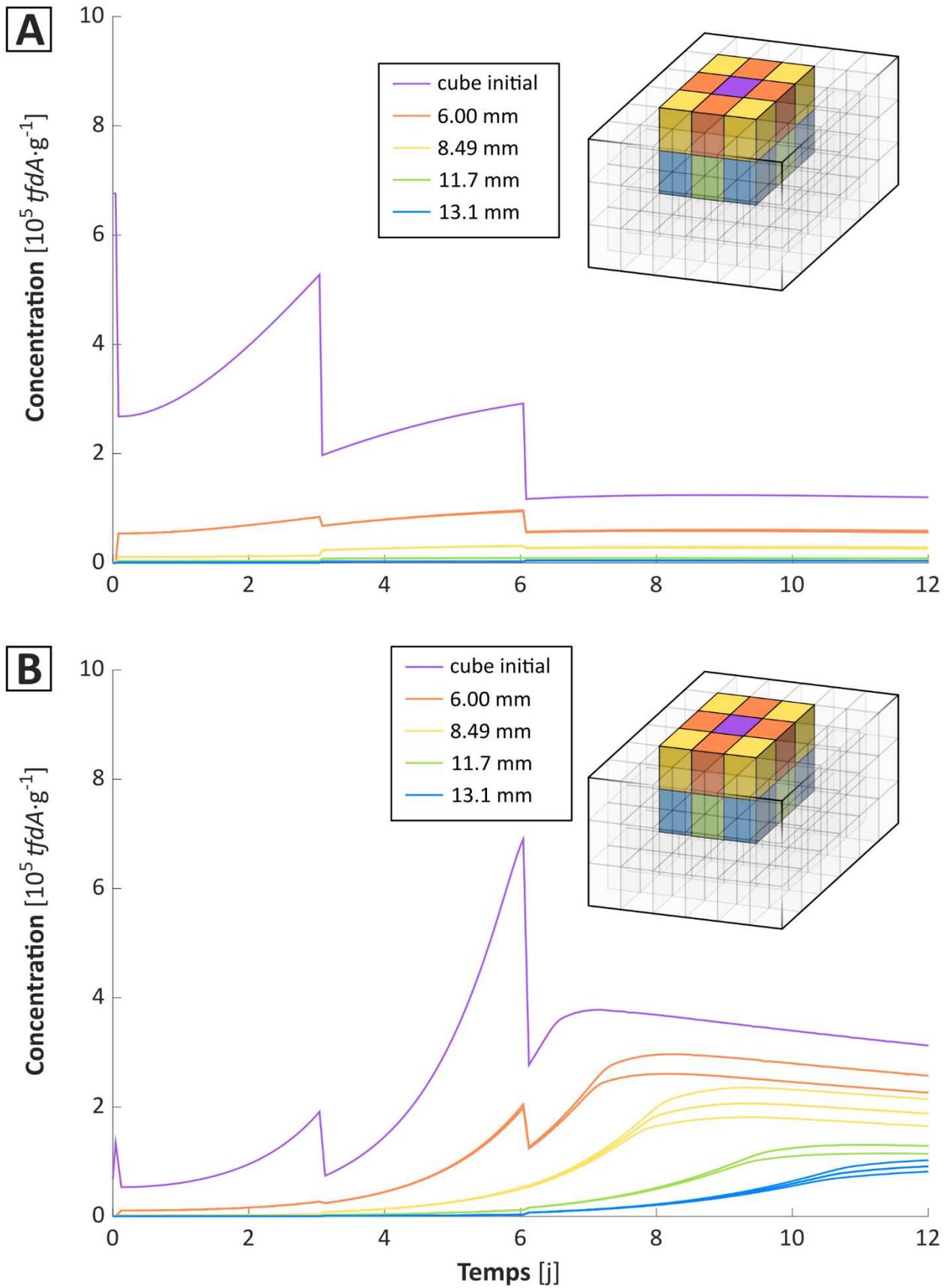


Figure III.7. Localisation des flux de carbone à travers la dynamique des bactéries, pour le modèle de Monod calibré en hydrostatique (A) et pour le modèle de Monod calibré en hydrostatique et percolation (B). Les paramètres biologiques correspondent à leur valeur calibrée, mais le

coefficient de dispersion d_{disp} est choisi identique dans les trois simulations, égal à $1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$ afin de reproduire une dispersion significative et comparable.

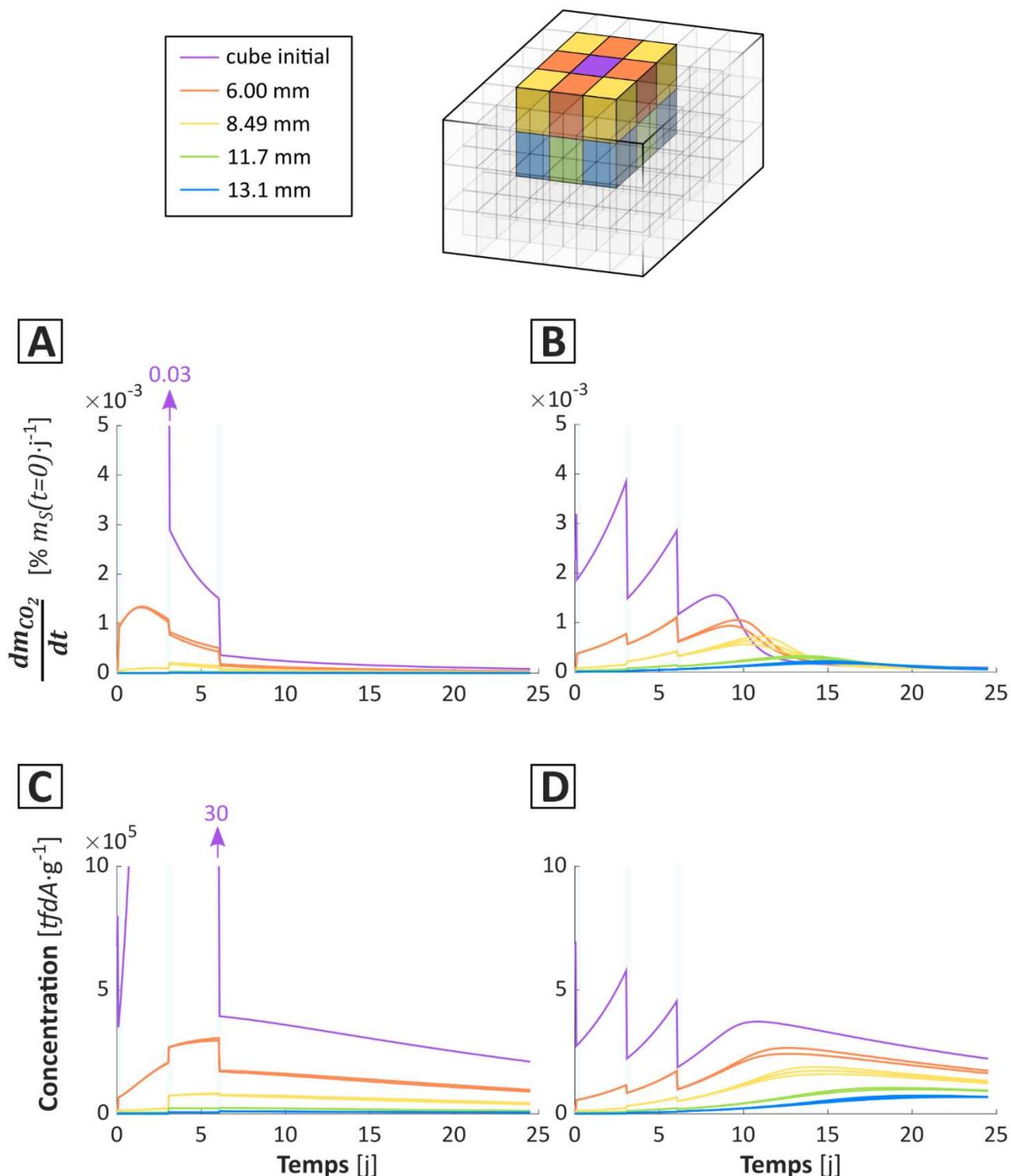


Figure III.8. Localisation des flux de carbone à travers la dynamique du CO₂ (A, B) et des bactéries (C, D), pour les bactéries copiotrophes (A, C) et oligotrophes (B, D) « modèles ». Les deux jeux de paramètres sont définis en section III.1.4.2. Le coefficient de dispersion d_{disp} est choisi identique

dans les trois simulations, égal à $1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$ afin de reproduire une dispersion significative et comparable.

En résumé, lorsque des bactéries copiotrophes se trouvent dans des environnements relativement pauvres, l'activité individuelle des bactéries est très vite limitée par la concentration en substrat. Ainsi, malgré la rétrodiffusion du substrat vers les bactéries, la concentration en substrat ne dépassera jamais une fraction de la concentration initiale, et l'activité des bactéries sera donc toujours limitée. C'est une limitation d'ordre physiologique, car c'est la réponse des bactéries à la concentration en substrat qui est en cause. Au contraire, lorsque ce sont des bactéries oligotrophes qui se trouvent dans des environnements pauvres, l'activité individuelle des bactéries va finir par être limitée non pas par la faible concentration mais par l'épuisement du substrat. C'est une limitation d'ordre spatial, car c'est l'occupation de l'espace par les bactéries qui est en cause. Ces deux situations sont récapitulées dans le **Tableau 3**. Selon la situation, la dispersion des bactéries aura un rôle utile ou inutile sur la minéralisation globale, opposé au rôle de la multiplication des bactéries.

Tableau 3. Bilan des types de limitations dans les deux situations caractéristiques illustrées par les deux calibrations. Les deux calibrations (« hydrostatique », et « hydrostatique & percolation ») traduisent deux cas de figure contrastés d'activité et de répartition des bactéries

	Facteur limitant l'activité individuelle μ/y des bactéries	Cause	Type de limitation ^a	Influence du nombre de bactéries sur la minéralisation globale
Calibration hydrostatique	Dilution du substrat	Efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$ trop faible	Limitation biologique	- Bactéries en sous nombre - Dispersion inutile - Multiplication utile
Calibration hydrostatique & percolation	Epuisement local du substrat	Bactéries trop agrégées	Limitation spatiale	- Bactéries en surnombre - Dispersion utile - Multiplication inutile

^a La notion de limitation s'entend ici à masse totale de substrat imposée.

La **Figure III.9** reprend cette conceptualisation de manière graphique et illustre deux situations en apparence semblables mais pour qui la dispersion entraînera des conséquences opposées. Le substrat est réparti de manière hétérogène dans un milieu donné. Deux situations sont considérées. Les bactéries sont placées de manière similaire dans les deux situations, c'est-à-dire principalement agglomérées à proximité des zones concentrées en substrat, mais les bactéries vertes ont une faible efficacité maximale d'absorption du substrat tandis que les bactéries bleues ont une forte efficacité maximale d'absorption. Du fait de

cette forte efficacité maximale d'absorption, les bactéries bleues engendrent une inversion du gradient de substrat à leur voisinage. Leur activité devient limitée par la quantité de substrat à laquelle elles sont accèes. La dispersion due à un épisode de percolation aura pour effet de dissiper cette compétition locale et de favoriser la dégradation. A l'inverse, les bactéries vertes sont peu efficaces et ont besoins d'être exposées à des concentrations élevées en substrat pour maintenir leur population et assurer une activité significative. Leur dispersion les déplacera dans des zones trop diluées en substrat et défavorisera la dégradation.

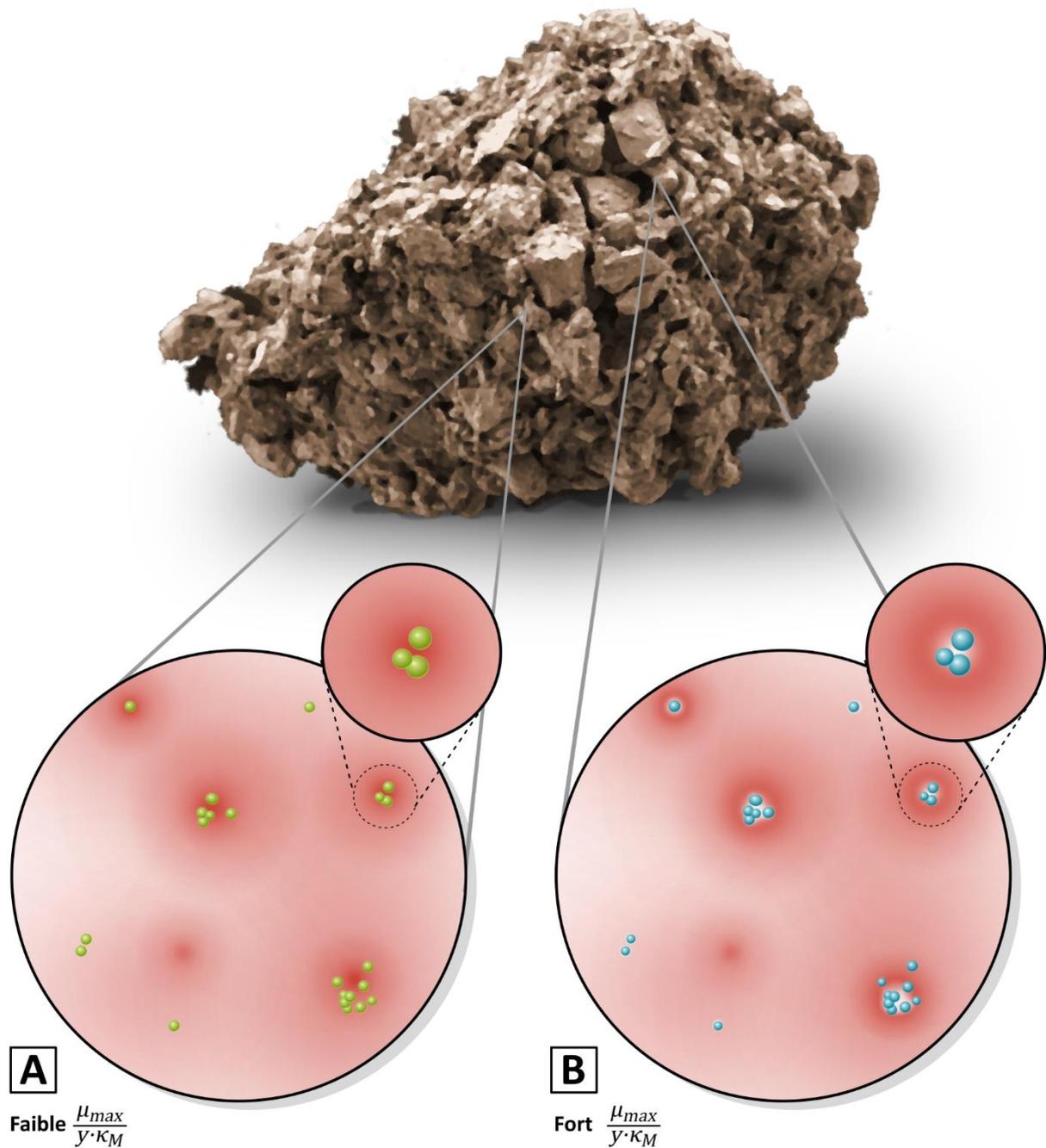


Figure III.9. Représentation graphique de deux situations opposées en termes d'impact de la dispersion. Le substrat (en rouge) présente une distribution hétérogène similaire dans les deux situations, avec quelques zones plus propices à recevoir des apports organiques et donc présentant des concentrations en substrat plus élevées. Les bactéries sont placées de manière similaire dans les deux situations, c'est à dire principalement agglomérées à proximité des zones concentrées en substrat, mais les bactéries vertes (A) ont une faible efficacité maximale d'absorption du substrat tandis que les bactéries bleues (B) ont une forte efficacité maximale d'absorption. Il en résulte que les bactéries vertes sont limitées par la dilution du substrat tandis que les bactéries bleues sont limitées par la compétition locale entre elles. Les quelques bactéries bleues solitaires et dispersées dans la partie gauche sont par contre épargnées du problème de l'épuisement local de la quantité de substrat disponible. La dispersion des bactéries (et/ou du

substrat), par exemple lors d'une percolation, aura pour effet de diminuer la minéralisation dans le cas (A) et de l'augmenter dans le cas (B). L'hétérogénéité spatiale de la minéralisation provient de l'hétérogénéité de la répartition spatiale du substrat dans le cas (A), tandis qu'elle provient de l'hétérogénéité de la répartition spatiale des bactéries dans le cas (B). L'illustration de l'agrégat dans la partie haute de la figure est adaptée de Totsche et al. (2018).

III.1.6. Cas d'une communauté bactérienne mixte

Dans le modèle utilisé dans la section III.1.2 et dans le reste de ce travail, les processus bactériens sont appliqués à une population considérée homogène et définie par des paramètres effectifs moyennés. Ce modèle simplifié est utilisé en priorité au regard de ses bonnes performances à reproduire les données expérimentales. La question des modalités requises pour reproduire les données expérimentales dans un modèle avec une communauté bactérienne mixte n'a pas été étudiée dans cette thèse. Il est néanmoins intéressant d'observer le comportement d'un modèle avec une communauté mixte. Ce point a été étudié en simulant une communauté composée de deux espèces, l'une copiotrophe et l'autre oligotrophe, initialement présentes en proportions égales. Les deux jeux de paramètres choisis correspondent aux deux jeux « modèles » déterminés dans la section III.1.4.2. Les résultats fournissent un complément d'information sur la caractérisation des traits d'histoire de vie (voir section III.1.4) des bactéries impliquées dans le système expérimental.

La **Figure III.10** montre les dynamiques de minéralisation du substrat par les deux populations bactériennes copiotrophes ou oligotrophes, dont les traits ont été illustrés dans la **Figure III.4**. Les minéralisations attribuées à chacune des deux populations sont semblables aux minéralisations simulées pour chaque population seule, par comparaison avec la **Figure III.5**. De manière plus générale, on pourrait ainsi envisager de décomposer les minéralisations observées expérimentalement en plusieurs signaux émanant de plusieurs populations bactériennes aux caractéristiques bien différenciées. Les deux populations de bactéries ont la même densité initiale et la même vitesse d'accommodation, correspondant à un délai de latence négligeable, et sont soumises à la même dispersion. On voit néanmoins que les copiotrophes sont principalement actifs dans les trois premiers jours, tandis que les oligotrophes sont moins actifs mais plus durablement. Ainsi la production de CO₂ pendant les 12 premiers jours résulte principalement de l'activité des copiotrophes, tandis que sur les 12 derniers jours elle résulte principalement de l'activité des oligotrophes.

On peut voir que la minéralisation expérimentale (points blancs) démarre tardivement mais atteint néanmoins une amplitude importante. Cela implique une activité significative des bactéries alors que les concentrations en substrat ont déjà été fortement diluées par la diffusion et que les bactéries sont déjà dispersées. La cinétique de minéralisation observée dans les expériences ne semble pas suggérer de rôle visible de la part de bactéries copiotrophes.

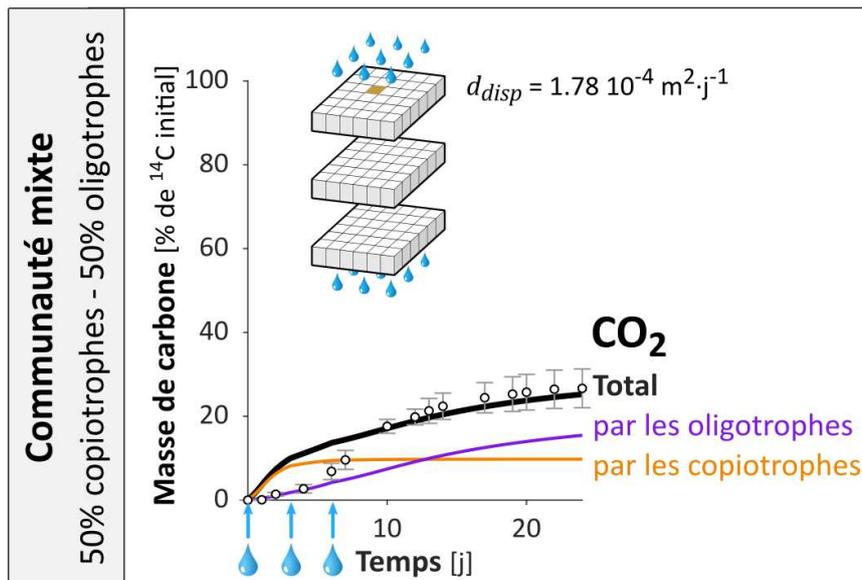


Figure III.10. Dynamiques de minéralisation prédites avec le modèle de Monod dans le cas d’une communauté bactérienne mixte combinant deux populations copiotrophes ou oligotrophes, dans le cas de l’expérience colocalisée en percolation. Les productions de CO₂ attribuées aux bactéries copiotrophes et oligotrophes sont indiquées respectivement en orange et en violet. Pour la légende, se reporter à **Figure III.5**. Les dynamiques de populations correspondantes sont représentées sur la **Figure III.11**. Lorsque l’on compare la biomasse dans le cube initial, et la biomasse dans l’ensemble des autres cubes, il apparaît que les bactéries copiotrophes sont principalement situées dans le cube initial jusqu’à la deuxième irrigation, tandis que les bactéries oligotrophes sont principalement situées en dehors du cube initial dès le début des expériences. Ces résultats mettent en valeur les deux environnements auxquels sont adaptées chacune de ces deux populations de bactéries. On peut penser que, par les mêmes mécanismes de dynamique de population, les bactéries copiotrophes dans les sols soient principalement présentes dans les zones en contact avec les apports de matière organique,

tandis que les bactéries oligotrophes soient principalement présentes dans le sol nu (*bulk soil*), en accord avec le postulat émis à la fin de la section III.1.2-4.3.

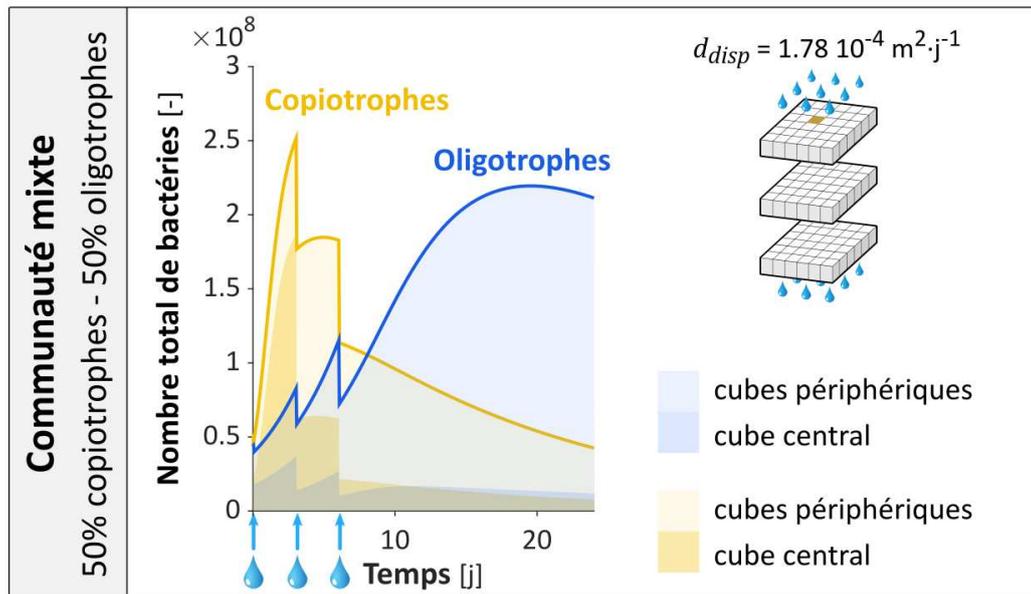


Figure III.11. Dynamiques des deux populations modélisées conjointement dans l'expérience colocalisée avec percolation. Les bactéries faiblement efficaces sont représentées en jaune, tandis que celles avec une forte efficacité maximale d'absorption sont représentées en bleu. La figure représente la biomasse attribuable à chacune de ces deux populations, sur l'ensemble de la colonne de sol.

Ces résultats mettent en évidence l'interaction entre les avantages sélectifs conférés par les traits métaboliques et les paramètres de transport. A noter que ce modèle ne prend pas en compte les transferts horizontaux de gènes entre bactéries de différentes populations. Il a été montré que, dans le cas de gènes portés par des plasmides et qui confèrent un avantage sélectif aux individus porteurs comme c'est le cas ici, ces transferts pouvaient être particulièrement pertinents au sein de communautés microbiennes complexes (Li et al., 2020).

Points clés

- ▶ Le rôle des répartitions spatiales et des processus de transport sur la minéralisation ne peut pas être déterminé sans connaître les traits bactériens.
- ▶ L'activité des bactéries dans un sol est régulée par un équilibre, local, entre la dilution du substrat et la compétition pour le substrat. ▶ L'efficacité maximale d'absorption déplace cet équilibre en accentuant la compétition locale.
- ▶ La dégradation globale d'une population de bactéries à forte efficacité maximale d'absorption est principalement limitée par la distance entre bactéries, tandis que la dégradation globale d'une population à faible efficacité maximale est principalement limitée par la distance entre les bactéries et l'origine du substrat.
- ▶ Les bactéries à faible efficacité maximale d'absorption peuvent potentiellement être limitées par la concentration trop faible en substrat (dilution), tandis que les bactéries à forte efficacité maximale d'absorption peuvent potentiellement être limitées par la quantité trop faible de substrat (compétition). ▶ La 1^{re} limitation est d'ordre biologique (efficacité trop faible), tandis que la 2^e est d'ordre spatial (bactéries trop agrégées). ▶ La dispersion des bactéries n'aura pas d'effet bénéfique sur la minéralisation globale dans le 1^{er} cas, tandis que la multiplication des bactéries n'aura pas d'effet bénéfique sur la minéralisation globale dans le 2nd cas.
- ▶ Les bactéries à faible efficacité maximale d'absorption colonisent plutôt les petits volumes très riches en substrat, à proximité des sources, tandis que les bactéries à forte efficacité maximale d'absorption se développent de manière plus uniforme dans le sol.

III.2. Compléments sur l'originalité des résultats

III.2.1. Compétition intra-populationnelle dans les sols

La densité de population est un paramètre écologique majeur au cœur des interactions écologiques (Haldane, 1956), qu'elles soient bénéfiques ou néfastes comme la compétition.

La compétition entre bactéries désigne la rivalité entre individus bactériens pour tirer profit d'une ressource commune limitée. Il est approprié de parler de compétition pour le substrat entre deux bactéries dès lors que la présence de la première bactérie a un impact négatif sur la quantité ou la concentration de substrat qui est, ou qui sera, absorbée par la deuxième bactérie. Ainsi, dans les expériences sur colonnes de sol considérées, la compétition pour le substrat est un processus sous-jacent continu, mais dont l'impact varie selon les situations. Cette compétition pour le substrat peut en effet avoir un rôle négligeable lorsque les bactéries sont peu nombreuses ou que le substrat est en excès pour les bactéries, ou au contraire un rôle déterminant lorsqu'un cluster de bactéries épuise localement le substrat. La compétition entre bactéries peut conditionner l'allocation du substrat entre elles sans pour autant avoir d'impact sur la minéralisation globale qui émane de la population bactérienne. Dans ce travail, nous ne nous intéressons qu'aux cas où la compétition entre individus a un impact sur la minéralisation émanant de la population bactérienne globale. Cela se produit lorsque la compétition est hétérogène spatialement, conduisant à des zones soumises à une compétition intense côtoyant d'autres zones où la compétition est négligeable, et qui pourraient potentiellement accueillir une plus forte compétition sans trop impacter l'activité des bactéries. Rigoureusement, le processus qui limite la minéralisation globale est donc un **déséquilibre local de compétition** dû à la répartition spatiale sous-optimale des bactéries et de leur substrat. Ce phénomène se produit lorsque le gradient de concentrations en substrat s'oppose au gradient de densités bactériennes. Le terme de compétition locale est utilisé dans cette thèse pour désigner cette opposition de gradients (la **Fig. 5C** (section III.1.2) et la **Figure IV.11D** en fournissent une illustration).

La compétition entre microorganismes au sein du sol est une problématique étudiée depuis plusieurs décennies (Marshall and Alexander, 1960; Ka et al., 1994). Deux points majeurs sont néanmoins à soulever. Le premier est que la compétition microbienne dans les sols a presque exclusivement été étudiée entre plusieurs populations, dans un objectif d'expliquer et prédire la composition en espèces des communautés microbiennes du sol. Le deuxième point est que des études de plus en plus nombreuses ont montré au cours des dernières décennies que le sol nu (*bulk soil*) offrait des conditions majoritairement protectrices contre la compétition, ce qui était à l'origine de la très forte diversité d'espèces qu'on y trouve.

En effet, l'étude de la compétition entre microorganismes est à la base de la « théorie de l'exclusion compétitive », formulée en écologie générale par Gause en 1934 et abondamment étudiée ensuite en microbiologie. Cette théorie prédit que, en régime stationnaire, le nombre d'espèces biologiques possédant une écologie semblable ne peut

pas être supérieur au nombre de variables environnementales exerçant une action sur la vitesse de croissance (ressources, inducteurs, inhibiteurs). Appliquée aux bactéries, cela signifie que, dans un environnement stable, deux populations bactériennes croissant sur le même substrat ne peuvent coexister. L'exclusion compétitive est généralement applicable dans les milieux aqueux parfaitement mélangés tels que le chémostat (Hansen and Hubbell, 1980). A l'inverse, la diversité d'espèces microbiennes observée dans les sols dépasse très largement le nombre de substrats. Cette divergence par rapport au principe d'exclusion s'explique en partie par la dynamique temporelle du sol, mais surtout par sa complexité spatiale, qui offre d'une part des refuges aux bactéries contre les prédateurs et parasites, et qui permet d'autre part l'isolement des populations microbiennes dû à la déconnection même partielle des films aqueux¹ dès lors que la teneur en eau est suffisamment basse (Vos et al., 2013). En effet, la diminution de la connectivité entre les films aqueux limite la motilité des bactéries, la diffusion des substrats et la diffusion des produits sécrétés et molécules signal et permet la coexistence de populations compétitrices autrement incompatibles (Treves et al., 2003; Dechesne et al., 2008). L'hétérogénéité spatiale des substrats favorise de même la multiplicité des habitats microbiens et la coexistence de populations variées (Portell et al., 2018). Même sans déconnection stricte entre les habitats, les hétérogénéités spatiales sont suffisantes pour déroger au principe d'exclusion, comme le montre cette étude sur chémostat à deux compartiments (Stephanopoulos and Fredrickson, 1979). En parallèle, d'autres études ont théorisé la relation entre la coexistence de plusieurs espèces et les limitations de diffusion. Par des simulations en chémostat, Lobry and Harmand (2006) ont montré que la ratio-dépendance de la vitesse spécifique de croissance permettait la coexistence de plusieurs espèces sur un même substrat et que cette ratio-dépendance était équivalente à une limitation de la vitesse spécifique de croissance par la diffusion du substrat. Les sols sont donc habituellement considérés comme des milieux réduisant la compétition inter-populationnelle.

Par ailleurs, d'autres études ont montré que l'hétérogénéité spatiale et temporelle d'un milieu avait pour conséquence, par rapport à un milieu uniforme et stable, de réduire l'échelle de la compétition, déportant la compétition entre populations vers la compétition entre individus (Pfeiffer et al., 2001; Roller and Schmidt, 2015).

Il a été par ailleurs montré que lors d'une compétition inter-populationnelle, les espèces croissant le plus vite (μ_{max} élevé) étaient favorisées, tandis que lors d'une compétition intra-populationnelle, les espèces croissant le plus efficacement, c'est-à-dire avec le meilleur rendement de conversion du substrat en biomasse (y élevé), étaient favorisées.

De tels résultats suggèrent que la réduction de la compétition inter-populationnelle dans les sols serait le reflet d'une augmentation de la compétition intra-populationnelle. Malgré ces

¹ « Film aqueux » est utilisé dans ce travail dans son sens générique, désignant la fraction aqueuse du sol (voir Lexique)

suggestions, la compétition intra-populationnelle n'a, à ma connaissance, jamais été étudiée dans les sols. Cela se traduit notamment par l'absence de toute utilisation de modèle de croissance bactérienne ratio-dépendant dans le sol nu (*bulk soil*). Cette absence notoire s'explique probablement du fait que la compétition est classiquement associée aux hautes densités de populations, comme c'est le cas par exemple dans les biofilms, alors que les densités observées dans les sols sont particulièrement faibles, comme discuté dans la section suivante (III.2.2). De manière plus générale, seules quelques très rares études ont mis en évidence la ratio-dépendance de la croissance microbienne dans des milieux peu densément peuplés, comme Hansen et al. (2017) dans un aquifère. Il convient de noter que certains travaux ont néanmoins étudié l'effet de la densité d'une population dans un sol, comme l'étude de Comeau et al. (1993) montrant des effets neutres ou bénéfiques de la densité initiale de décomposeurs sur la dégradation du 2,4-D, ou bien l'étude de Ebrahimi et al. (2019) sur la dégradation du carbone organique particulaire, ce dernier nécessitant l'action d'exoenzymes sécrétées par les microorganismes et profitant à l'ensemble de la population, conférant ainsi un rôle particulier à la densité de population.

La mise en évidence dans ce travail de **l'expression** et de la **prévalence** dans les sols nus de la compétition locale au sein d'une même population, en dépit de sa faible densité, sont des résultats particulièrement originaux. L'étude de cette compétition locale en lien avec la diffusion du substrat et le métabolisme des bactéries l'est encore plus. Enfin, cette étude semble être la première à montrer la pertinence de modèles de croissance ratio-dépendants dans les sols.

III.2.2. Densités de population et compétition locale

La mise en évidence par modélisation de l'importance de la compétition locale pour le substrat au sein d'une même population bactérienne (voir manuscrit section III.1.2) est étonnante au regard des faibles densités de population habituellement observées dans les sols. La section précédente (III.2.1) propose d'ailleurs que cela puisse expliquer l'absence d'études sur cette thématique. Comme cela a été discuté dans les sections III.1.2-4.1.1, la régulation majeure de la minéralisation du sol par la densité bactérienne, surprenante en apparence, est en fait possible en raison des très fortes efficacités maximales d'absorption d'une partie des bactéries, qualifiées d'oligotrophes, couramment rencontrées dans les sols nus. Les valeurs d'efficacité d'absorption ont été préalablement discutées mais pas les valeurs de densités de population, ce que se propose de faire cette section.

III.2.2.1. Détermination des densités bactériennes limitantes

Il est tout d'abord à noter que le modèle postule que les processus, autant de transport que bactériens, peuvent être agrégés à l'échelle de la résolution spatiale du système (mm) et que les valeurs des paramètres, en particulier les densités bactériennes, constituent des moyennes effectives. Cela signifie que les densités bactériennes simulées ne sont pas nécessairement égales aux densités réelles au sein des colonnes de sol même si la minéralisation qui en résulte coïncide dans celle qui est simulée. Ces valeurs effectives des

densités et des paramètres biologiques intègrent les processus aux échelles inférieures à la résolution spatiale, qui ne sont pas représentés dans cette thèse. Néanmoins, l'adéquation des densités effectives avec les densités mesurées expérimentalement dans les sols montrent que la différence reste limitée.

Le déséquilibre spatial de compétition se traduit par un gradient de concentration en substrat inverse au gradient de densité bactérienne. Dans cette situation les bactéries sont défavorisées car les zones les plus denses en bactéries sont exposées aux concentrations en substrat les plus basses. Nous nous intéresserons plus particulièrement à deux situations. La première est la situation extrême dans laquelle les zones les plus denses en bactéries finissent par atteindre une concentration quasi-nulle en substrat, qui reste par ailleurs relativement élevée dans les zones voisines, comme c'est typiquement le cas sur la **Figure III.12**. La deuxième est la situation où le coefficient de dispersion d_{disp} des bactéries est optimal, c'est-à-dire que la minéralisation est maximale avec cette dispersion et que le gradient de substrat concorde relativement bien avec gradient des bactéries. Dans chacun des deux cas, nous déterminerons quelle est la densité bactérienne maximale dans un cube de sol de $6 \times 6 \times 10 \text{ mm}^3$ qui est nécessaire pour induire une telle situation, au sein du système étudié. Enfin en troisième estimation, une densité bactérienne « critique » sera déterminée en comparant les paramètres κ_M et $B \cdot \kappa_C$ des modèles respectifs de Monod et de Contois pour les calibrations en hydrostatique et percolation, par la formule $B_{(critique)} = \frac{\kappa_M}{\kappa_C}$.

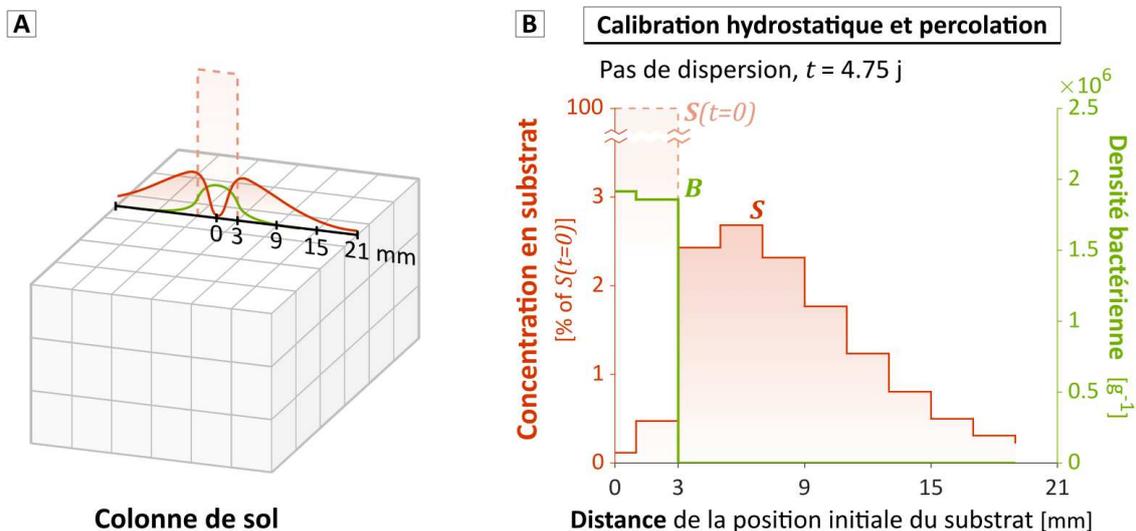


Figure III.12. Profil spatial de concentrations en substrat et en bactéries. La partie (A) donne une représentation schématique dans l'espace des profils montrés sur la partie (B). Le modèle représenté correspond au modèle de Monod avec la calibration en hydrostatique et percolation. La concentration en substrat S (en rouge) est exprimée en pourcentage de la concentration initiale. Le profil initial de substrat $S(t=0)$ est rappelé en rouge pâle. La densité bactérienne B (en vert) est exprimée en bactérie par masse de sol sec. La densité de bactéries associée à la déplétion du substrat vaut autour de $1.54\text{-}1.92 \cdot 10^6 \text{ g}^{-1}$ selon la discrétisation spatiale de la simulation (ici la colonne de sol est discrétisée en $18 \times 18 \times 9$ voxels). L'efficacité maximale

d'absorption des bactéries vaut $26.5 \text{ g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{j}^{-1}$ (masse de sol sec par masse de carbone bactérien par unité de temps), équivalent à $3.94 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{j}^{-1}$ (masse de sol sec par bactérie par unité de temps).

Avec la calibration en hydrostatique et percolation, et sans dispersion des bactéries, la concentration en substrat atteint zéro à sa position initiale dès le jour 5. La densité bactérienne à sa position initiale vaut alors $1.54 \cdot 10^6 \text{ g}^{-1}$ (bactéries par masse de sol sec). Pour cette même calibration, la valeur optimale du coefficient de dispersion d_{disp} est $1.78 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$. Avec cette dispersion, la densité bactérienne ne dépasse pas $6.85 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$ dans l'expérience. Enfin le ratio κ_M/κ_C correspond à une densité bactérienne de $2.53 \cdot 10^5 \text{ g}^{-1}$. Ces trois valeurs de densités sont rappelées dans le **Tableau 4**. Ces valeurs de densités bactériennes sont en accord avec les densités classiquement mesurées pour les dégradeurs du 2,4-D. Les bactéries capables de dégrader le 2,4-D représentent une part variable de la population bactérienne totale (Veeh et al., 1996). Dans les sols utilisés par Pallud et al. (2004), les densités apparentes de dégradeurs du 2,4-D avoisinent en moyenne les $1.5 \cdot 10^3 \text{ g}^{-1}$ (bactéries par masse de sol sec) en l'absence d'amendement de 2,4-D, soit 0.004% de la population totale de bactéries. Après apport de 2,4-D, les densités peuvent atteindre $6 \cdot 10^6 \text{ g}^{-1}$ soit plus de 15% de la population totale. Par ailleurs, la densité apparente totale de cellules microbiennes dans les sols est généralement comprise entre 10^7 et 10^{12} g^{-1} (Kuziyakov and Blagodatskaya, 2015), avec une densité moyenne de procaryotes¹ dans les sols estimée à l'échelle de la planète à $2.6 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-3}$ (bactéries par volume apparent de sol) (Or et al., 2007). Les densités de dégradeurs du 2,4-D modélisées dans cette thèse, en accord avec les autres études sur le sujet, représentent des densités qu'on peut qualifier de très faibles en absolu. En effet, en considérant les caractéristiques physiques du sol des expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018), et en considérant des bactéries de volume $1\text{-}2 \mu\text{m}^3$ (fourchette englobant les valeurs déterminées par Balkwill et al. (1988) ainsi que les valeurs extrapolées à partir des masses considérées par Dechesne et al. (2010)), la compétition locale est limitante vis-à-vis de la dégradation globale dès lors que les dégradeurs du 2,4-D occupent autour de 0.0012-0.0025‰ du volume aqueux du sol.

III.2.2.2. Conversion des densités bactériennes en distance entre bactéries

La déduction de la distance moyenne entre des particules (ici des bactéries) réparties dans l'espace à partir de leur densité est une question transversale à de nombreux domaines (O'Keeffe, 2012). Dans la plupart des cas, la distance d'intérêt est la distance euclidienne² moyenne entre les particules plus proches voisines. Aux densités auxquelles on s'intéresse, on peut assimiler les bactéries à des particules ponctuelles (points de zéro dimension). La distribution uniforme et régulière la plus dense possible de points dans un espace en trois dimensions (**Figure III.13A**) est analogue à la distribution uniforme et régulière la plus dense

¹ Les eucaryotes englobent les bactéries et les archées. La caractérisation des communautés microbiennes du sol inclut le plus souvent ces deux domaines du vivant.

² La distance euclidienne correspond à la longueur du segment de droite entre deux points de l'espace.

possible de sphères identiques (Brunner, 1971; O’Keeffe, 2012), qui peut être représentée par le remplissage hexagonal serré de sphères dans l’espace (*hexagonal close packing*), conjecturé par Kepler (Hales, 2011), et qui permet d’obtenir la relation suivante (voir détails Encart 2) :

$$d = 2 \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{1}{B} \right)^{\frac{1}{3}} \approx 1.1225 \left(\frac{1}{B} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Éq 17}$$

avec d la distance euclidienne entre chaque couple de plus proches cellules voisines et B la densité en bactéries exprimée en nombre de cellules par volume apparent de sol.

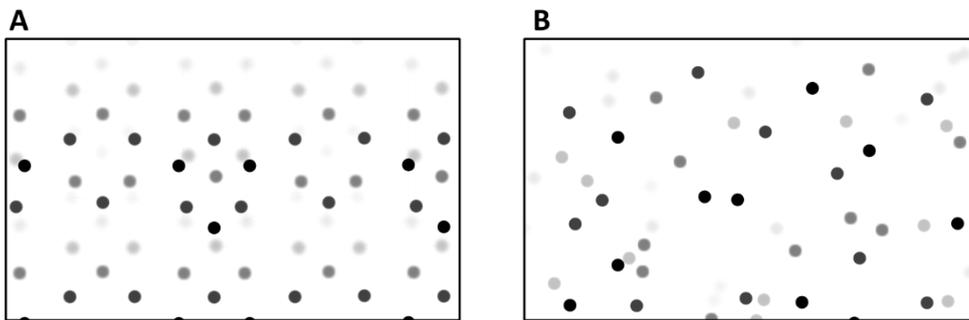


Figure III.13. Représentation schématique de la répartition de points dans l’espace, selon deux agencements spatiaux, pour une même densité globale de population. (A) montre la répartition régulière uniforme la plus dense possible, dérivée de l’empilement spatiale de sphères selon un remplissage « hexagonal serré ». (B) montre une répartition uniforme aléatoire (loi stationnaire de Poisson).

Encart 2. *Close Hexagonal Packing*

L’un des empilements de sphères identiques permettant de minimiser l’espace entre les sphères (porosité) est le « remplissage hexagonal serré ». Dans cette configuration, la fraction de l’espace occupée par les sphères vaut $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$. Avec V le volume total du système considéré et N le nombre de sphères, de rayon r , on peut écrire :

$$\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = \frac{N \frac{4}{3} \pi r^3}{V} \quad \text{Éq 18}$$

La distance qui sépare les centres de chaque sphère en contact vaut le double du rayon, soit l’expression de l’Éq 17.

L’Éq 21 correspond au maximum théorique de la distance moyenne \bar{d} entre plus proches voisines. Dans un sol, la répartition spatiale des bactéries est beaucoup plus irrégulière que

cela, ce qui impacte la distance entre plus proches voisines. Si l'on considère une répartition aléatoire uniforme des bactéries dans l'espace (**Figure III.13B**), de sorte que la position de chaque bactérie soit indépendante des autres, on peut décrire la densité de probabilité par une loi stationnaire de Poisson (*stationary Poisson point process*) :

$$P(q) = \frac{(N_V V)^q}{q!} e^{-N_V V} \quad \text{Éq 19}$$

avec $P(q)$ la probabilité de trouver exactement q bactéries ponctuelles dans un volume V , avec N_V la densité de particules. On obtient alors la relation suivante entre la distance euclidienne moyenne \bar{d} entre chaque couple de plus proches bactéries et la densité bactérienne B (Chandrasekhar, 1943; Tewari and Gokhale, 2004) :

$$\bar{d} = 0.5539602785 \left(\frac{1}{B}\right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Éq 20}$$

La distance moyenne entre plus proches voisines aura tendance à diminuer avec l'agrégation des cellules, bien qu'il n'existe pas d'expression connue de la relation entre cette distance et le degré d'hétérogénéité de la répartition spatiale. On s'attend à ce que la répartition des bactéries dans les sols soit encore plus irrégulière que la répartition aléatoire uniforme, ce qui pourrait réduire encore la distance euclidienne moyenne (Raynaud and Nunan, 2014). Par ailleurs, la prise en compte du volume aqueux a une influence importante sur la proximité entre les bactéries (Tecon et al., 2018). Seules les bactéries présentes dans les films d'eau, qui représentent 27% du volume apparent du sol (Pinheiro et al., 2015), peuvent être en contact avec le substrat dissout. La prise en compte du volume aqueux augmente les densités bactériennes d'un facteur 4 (**Tableau 4**), ce qui tend à réduire encore les distances moyennes entre voisines d'un tiers. Il faut enfin ajouter que la position précise des bactéries au sein des films d'eau demeure une question non tranchée, mais il est envisageable que les bactéries soient préférentiellement en contact avec la surface des particules solides du sol. Dans ce cas, la distance moyenne entre voisines peut s'en trouver encore réduite. Le ratio de la densité surfacique sur la densité volumique de bactéries est inversement proportionnel au ratio surface sur volume, qui tend à diminuer avec la taille des pores et à augmenter avec la surface spécifique¹ (*specific surface area*) du sol. Néanmoins, la distance euclidienne ne rend pas compte de la géométrie complexe des pores du sol. La distance réelle la plus courte séparant les bactéries est déterminée par la distance géodésique² qui est plus élevée que la distance euclidienne dans les milieux poreux (Ghanbarian et al., 2013). Le rapport entre les distances euclidiennes et géodésiques sert à définir la tortuosité géométrique de la structure

¹ Ratio entre la surface réelle de la phase solide du sol et le volume apparent

² La distance géodésique est la plus courte distance entre deux points en tenant compte des « obstacles » c'est-à-dire des surfaces du milieu.

porale du sol, qui avoisine 1.5 dans des sols comparables (Ghanbarian et al., 2013; Vogel et al., 2015).

Il en ressort que la relation entre l'éloignement euclidien et l'éloignement réel entre les bactéries est ainsi une question complexe. Il semble cependant raisonnable d'estimer que les distances euclidiennes associées aux densités critiques définies précédemment en section III.2.2.1 correspondent à l'ordre de grandeur des distances réelles entre plus proches voisines. Ces distances sont de l'ordre de plusieurs dizaines de μm , c'est-à-dire plusieurs dizaines de fois la taille des bactéries, voire au-delà comme cela a été observé (Vos et al., 2013). Ainsi, une répartition « éparsée » des bactéries telle que cela se rencontre communément dans le sol nu peut tout-à-fait être le siège d'une compétition intense entre les bactéries pour le substrat, avec un impact limitant majeur sur la minéralisation.

Tableau 4. Correspondances entre les valeurs de densité bactérienne et la distance entre bactéries plus proches voisines. Les trois situations indiquées constituent les trois manières décrites, dans cette section, de considérer la densité de bactéries à partir de laquelle la compétition locale pour le substrat devient un processus majeur limitant la minéralisation. Les distances sont données en considérant les densités bactériennes par volume de sol apparent.

Situation (à partir des simulations calibrées en hydrostatique et percolation)	Densité bactérienne effective simulée			Distance euclidienne moyenne entre plus proches voisines [μm]	
	[cellule par gramme de sol sec] ^a	[cellule par m ³ apparent de sol] ^b	[cellule par m ³ aqueux] ^c	en remplissage hexagonal serré	en répartition uniforme aléatoire
B quand $S = 0$	$1.54 \cdot 10^6$	$2.00 \cdot 10^{12}$	$7.52 \cdot 10^{12}$	89.0	43.9
$\max(B)$ avec d_{disp} optimale	$6.85 \cdot 10^5$	$8.90 \cdot 10^{11}$	$3.34 \cdot 10^{12}$	117	57.6
$B = \kappa_M/\kappa_C$	$2.53 \cdot 10^5$	$3.29 \cdot 10^{11}$	$1.23 \cdot 10^{12}$	163	80.3

^a Les conversions d'unités à partir des unités du modèle sont effectuées en considérant une masse moyenne par bactérie de $2.8 \cdot 10^{-13}$ g et une proportion massique de carbone de 53.1% (Dechesne et al., 2010)

^b La masse volumique apparente du sol est de $1300 \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ (masse de sol sec par volume apparent) (Pinheiro et al., 2015)

^c La saturation volumique en eau est de 26.65% (volume d'eau par volume de sol apparent) (Pinheiro et al., 2015)

Points clés

- ▶ Il est difficile d'estimer avec exactitude les distances réelles qui séparent les bactéries dans les sols. Néanmoins, en utilisant les valeurs de forte efficacité maximale d'absorption courantes dans les sols, le modèle montre que la compétition locale pour le substrat peut apparaître entre des bactéries éloignées de plusieurs dizaines de μm .
- ▶ Il a par ailleurs été montré que les hétérogénéités spatiale et temporelle ainsi que les contraintes de diffusion, qui sont des facteurs bien connus pour expliquer la faible compétition entre espèces dans les sols, sont susceptibles de déplacer l'échelle de la compétition depuis le niveau inter-populations vers le niveau inter-individus.

III.3. Compléments sur le modèle de transport réactif

Les conclusions présentées précédemment ont été obtenues en confrontant les données expérimentales aux simulations obtenues par le modèle de transport réactif défini dans l'article (section III.1.2-2.3). La partie physique de ce modèle repose sur trois postulats principaux. Le premier considère que la composante verticale du transport des bactéries est similaire à celle du substrat, et indépendante de la dispersion hydrodynamique de ces deux espèces. Cela permet de postuler que la composante verticale du transport n'influe pas sur l'exposition des bactéries à leur substrat autrement qu'au travers de la lixiviation hors de la colonne de sol. Le deuxième postulat considère que la dispersion est isotrope, ce qui permet également de simplifier la composante verticale du transport. Le troisième postulat considère que la dispersion hydrodynamique du substrat n'impacte pas la nature des conclusions, ce qui permet de fortement faciliter l'interprétation des résultats. La validation de ces postulats a été exposée brièvement dans le matériel supplémentaire de l'article (sections III.1.3-S3). La section ci-dessous propose d'éprouver le modèle de transport au-delà des résultats présentés précédemment.

III.3.1. Découplage advection-dispersion : impact de la lixiviation des bactéries

Comme mentionné dans la description du modèle de l'article (section III.1.2-2.3) et éprouvé dans le matériel supplémentaire (section III.1.3-S3), les taux de lixiviations ν du substrat et des bactéries ont été considérés suffisamment proches au sein d'une même expérience et entre les différentes expériences pour être présumés égaux et uniformes à l'échelle de la colonne de sol, étant donné que la perte de ^{14}C dans les lixiviats était similaire entre les expériences malgré des répartitions et des quantités de bactéries et de substrat très différentes.

La sensibilité de cette hypothèse a été approfondie. En plus du cas présenté dans l'article où les bactéries et le substrat sont lessivés au même taux, deux autres situations ont été testées, en accord avec les analyses préliminaires (section II.2.1). Dans l'une des situations, seul le substrat a été lixivié, tandis que dans l'autre situation, les bactéries ont été lixiviées¹ proportionnellement deux fois plus que le substrat, ce qui signifie que la fraction lixiviée de la biomasse correspondait au double de la fraction lixiviée du substrat (en masse de ^{14}C). Dans chacune des situations, la concordance entre les masses globales de carbone lixiviées simulée et expérimentale a été respectée.

¹ Bien que pouvant désigner au sens général tout phénomène d'entraînement par l'eau, le terme de *lixiviation* est souvent utilisé pour désigner spécifiquement le transport de solutés par advection dans le sol. L'entraînement de particules solides par l'eau est alors désigné sous le terme de *lessivage*. Dans ce manuscrit, par soucis de simplicité, l'entraînement par l'eau d'espèces dissoutes ou particulaires hors de la colonne de sol sera indistinctement désigné sous le terme de *lixiviation*.

Les résultats présentés sur la **Figure III.14** montrent que, pour les modèles calibrés sur les données expérimentales, ni le degré final de minéralisation ni l'optimum de dispersion bactérienne ne sont significativement impactés par le taux de lixiviation des bactéries. La relation entre la dispersion des bactéries et la minéralisation reste de même nature, avec une diminution parfois plus marquée pour les fortes dispersions (**Figure III.14B**), parfois plus marquée pour les faibles dispersions (résultats non montrés).

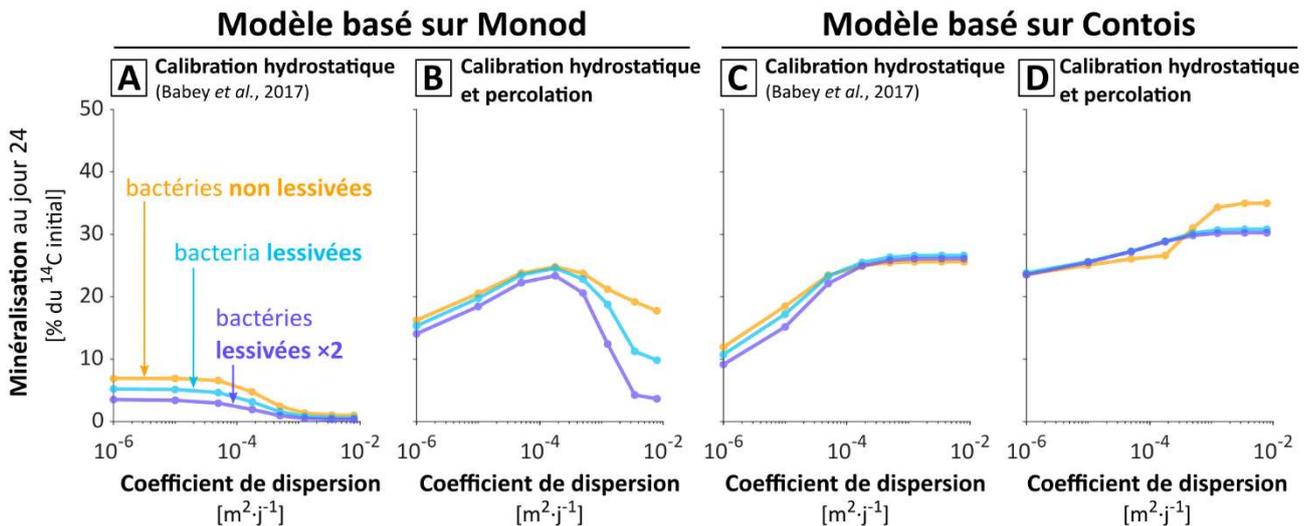


Figure III.14. Impact de la lixiviation des bactéries sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation. Trois modalités de lixiviation des bactéries sont représentées : pas de lixiviation (en orange), lixiviation des bactéries égale en proportion à celui du substrat (en bleu), lixiviation des bactéries égale en proportion au double de celui du substrat (en violet). Les résultats en bleu correspondent aux résultats présentés précédemment dans le manuscrit de la section III.1.2. Les résultats sont montrés pour les modèles de Monod (A-B) et de Contois (C-D), pour les jeux de paramètres biologiques calibré sur les traitements hydrostatiques seuls (A et C) ou calibré sur les traitements hydrostatiques et en percolation (B et D).

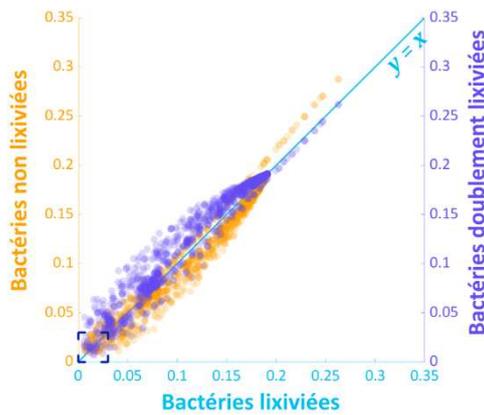
La **Figure III.15** représente les inadéquations J_4 (voir éq. (15) de la section III.1.2-2.5) entre les cinétiques de minéralisation simulées et expérimentales, toujours dans le cas du traitement colocalisé en percolation. La faible dispersion des points autour de la diagonale montre que les adéquations avec les données ne sont que faiblement altérées par le taux de lixiviation des bactéries. Cela indique que les cinétiques de minéralisation demeurent semblables. Les résultats sur l'ensemble des jeux de paramètres biologiques (**Figure III.15A**) montrent une tendance à l'augmentation de l'inadéquation lorsque le taux de lixiviation des bactéries augmente, visible par la répartition des points oranges et violets de part et d'autre de la diagonale. Néanmoins, cette tendance n'est pas mise en évidence sur les meilleurs jeux de paramètres, comme le montre l'observation des inadéquations inférieures à 0.03 (**Figure III.15B**). Les résultats sur le modèle de Contois (**Figure III.16**) montrent les mêmes conclusions.

Le taux de lixiviation des bactéries n'est donc pas un élément déterminant de l'analyse, et il apparaît raisonnable de postuler un taux égal à celui du substrat, voire de postuler l'absence de lixiviation des bactéries afin de simplifier la modélisation et les interprétations.

Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Monod

(hétérogène en percolation)

A Vue générale



B Représentation des adéquations $J_4 < 0.03$

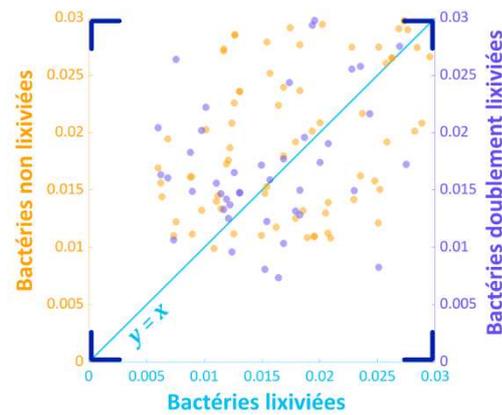
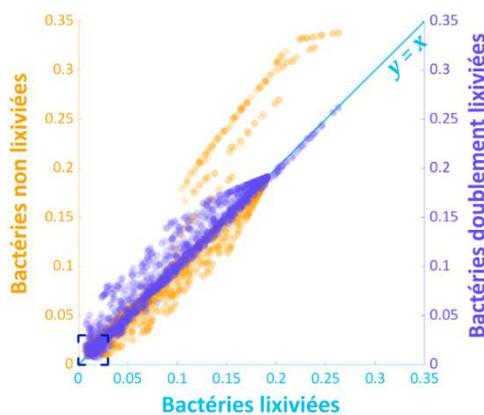


Figure III.15. Capacité prédictive du modèle de Monod pour le traitement colocalisé avec percolation, selon un taux de lixiviation des bactéries nul (orange), égal au double de celui du substrat (violet), ou égal à celui du substrat (bleu). Le panneau gauche (**A**) montre l'ensemble des 2401 jeux de paramètres biologiques explorés, tandis que le panneau droit (**B**) montre le détail des valeurs inférieures à 0.03.

Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Contois

(hétérogène en percolation)

A Vue générale



B Représentation des adéquations $J_4 < 0.03$

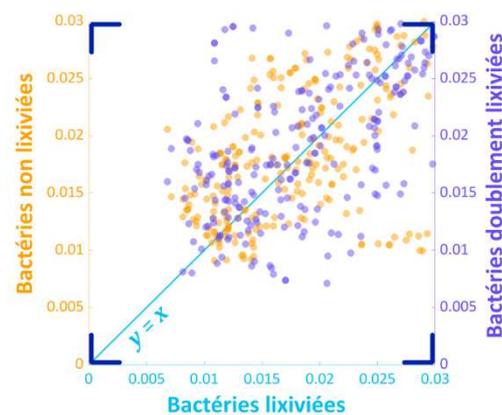


Figure III.16. Capacité prédictive du modèle de Contois pour le traitement colocalisé avec percolation, selon un taux de lixiviation des bactéries nul (orange), égal au double de celui du substrat (violet), ou égal à celui du substrat (bleu). Le panneau gauche (**A**) montre l'ensemble des 2401 jeux de paramètres biologiques explorés, tandis que le panneau droit (**B**) montre le détail des valeurs inférieures à 0.03.

III.3.2. Impact de l'anisotropie de la dispersion

Comme indiqué dans l'article (section III.1.2-2.3), la dispersion hydrodynamique du substrat et des bactéries engendrée par la percolation a été considérée isotrope, en première approximation. La sensibilité de ce postulat a été discutée en annexe de l'article (section III.1.2-**Fig. S3**). Ce point est abordé plus en détails ici.

Dans les milieux poreux saturés, il est largement établi que l'advection de solutés conduit à une dispersion hydrodynamique plus importante dans la direction de l'écoulement (Ogata, 1970). Néanmoins, la dispersion hydrodynamique dans les sols non-saturés est un processus beaucoup plus complexe que dans les sols saturés (Jimenez-Martinez et al., 2017), et la quantification du caractère anisotrope n'est pas évidente, surtout lorsque la vitesse d'écoulement est faible (Bijeljic and Blunt, 2007) comme c'est supposé être le cas dans les expériences de Pinheiro et al. (2018). A cause du manque de données expérimentales adéquates pour pouvoir caractériser les processus de dispersion dans ces expériences, et étant donné le manque actuel de recul sur ces phénomènes en milieux non-saturés, nous avons décidé d'utiliser le modèle le plus simple, à savoir une dispersion isotrope du substrat et des bactéries. Néanmoins, afin de déterminer l'impact de l'anisotropie sur les résultats et conclusions de l'article, un nouveau criblage a été réalisé en considérant cette fois-ci une dispersion hydrodynamique anisotrope. Le coefficient de dispersion longitudinale $d_{disp,L}$ a été choisi un ordre de grandeur plus grand que le coefficient de dispersion transversale $d_{disp,T}$, afin de reproduire les conditions maximales admissibles d'anisotropie identifiées par Bijeljic and Blunt (2007). Afin de pouvoir comparer les deux criblages entre eux, les coefficients de dispersion longitudinaux et transverse ont été choisis de manière à ce que la dispersion moyenne résultante corresponde aux valeurs de dispersion isotropes, selon la formule suivante :

$$\frac{1}{3}d_{disp,L} + \frac{2}{3}d_{disp,T} = d_{disp} \quad \text{Éq 21}$$

La **Figure III.17** illustre les différences de résultats pour les jeux de paramètres calibrés sur les données expérimentales. Les résultats de l'article, obtenus avec une dispersion isotrope, sont représentés en transparence, tandis que les nouveaux résultats obtenus avec une dispersion anisotrope sont représentés avec les courbes opaques. L'anisotropie de la dispersion déplace légèrement la dispersion optimale vers des valeurs plus élevées, mais de manière limitée. Les dynamiques de minéralisations restent semblables. L'anisotropie de la dispersion permet également d'obtenir une adéquation légèrement meilleure avec les données pour le modèle de Contois.

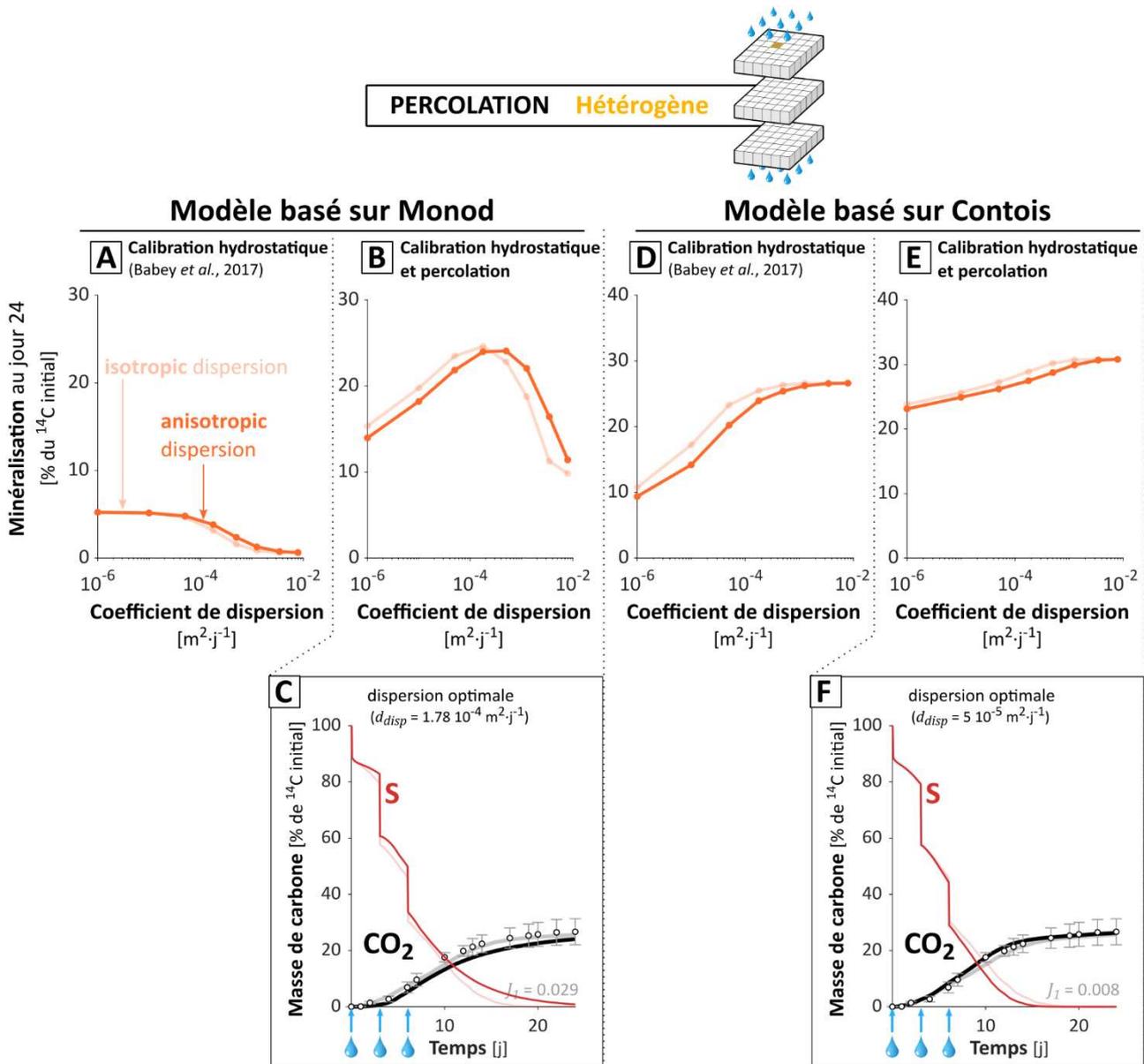


Figure III.17. Impact de l'anisotropie de la dispersion hydrodynamique du substrat et des bactéries sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation. Deux modalités de dispersion hydrodynamique sont testées, la première isotrope, la seconde anisotrope avec un coefficient de dispersion transversale 10 fois plus élevé que celui de la dispersion longitudinale. Les résultats sont représentés en transparence pour la dispersion isotrope, et avec les courbes opaques pour la dispersion anisotrope, pour les modèles de Monod (A, B, C) et de Contois (D, E, F). Les figures de la première ligne (A, B, D, E) illustrent la relation entre le coefficient de dispersion optimal et la minéralisation pour les jeux de paramètres calibrés, tandis que les figures de la deuxième ligne (C, F) illustrent les dynamiques de minéralisation pour les jeux de paramètres calibrés à la fois sur les expériences hydrostatiques et en percolation (et représentés respectivement en B et E).

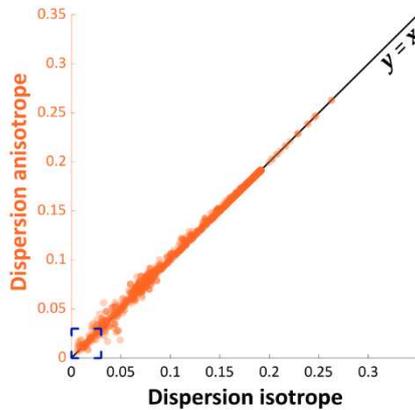
Les résultats sur l'ensemble du criblage sont représentés sur la **Figure III.18**. L'écart entre les minéralisations prédite et expérimentale reste sensiblement similaire peu importe que la

dispersion hydrodynamique soit isotrope ou anisotrope, autant avec le modèle basé sur Monod que basé sur Contois.

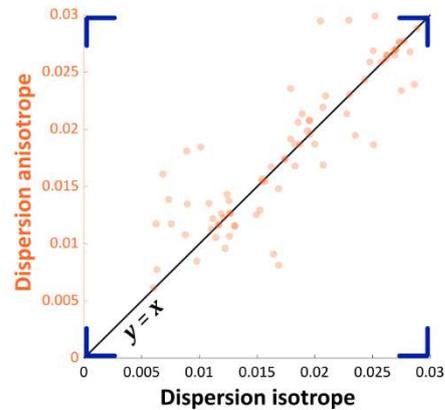
Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Monod

(hétérogène en percolation)

A Vue générale



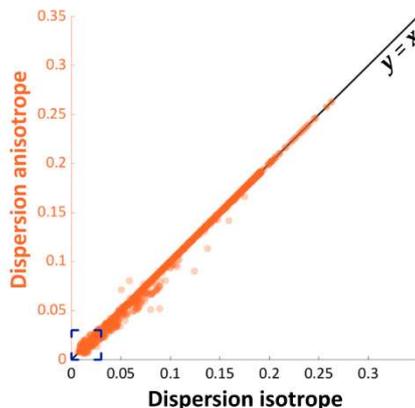
B Représentation des adéquations $J_4 < 0.03$



Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Contois

(hétérogène en percolation)

C Vue générale



D Représentation des adéquations $J_4 < 0.03$

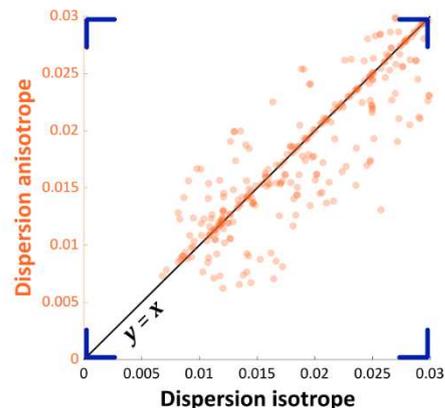


Figure III.18. Capacité prédictives des modèles en fonction de l'anisotropie de la dispersion hydrodynamique. La droite $x = y$ montre l'équivalence parfaite entre les résultats obtenus avec une dispersion isotrope (valeurs en noir) et ceux obtenus avec une dispersion anisotrope (valeurs en orange), pour le modèle de Monod (**A** et **B**) et de Contois (**C** et **D**). Les figures sur le volet droit représentent un focus sur plus petites valeurs d'inadéquation entre les simulations et les données.

L'anisotropie de la dispersion hydrodynamique engendre une dispersion des bactéries plus grande dans la direction longitudinale et plus faible dans les directions transversales. La diffusion continue du substrat reste, elle, isotrope. La faible sensibilité du modèle à l'anisotropie de la dispersion s'explique vraisemblablement par la géométrie du système. La colocalisation initiale des bactéries et du substrat confère en effet au système une symétrie radiale. Avec une telle symétrie, l'impact de la dispersion longitudinale plus élevée des

bactéries sur l'équilibre entre *dilution du substrat* et *compétition bactérienne* est simplement contrebalancé par l'impact de la dispersion transversale plus faible. Ces résultats renforcent la pertinence de choisir la dispersion effective moyenne comme prédicteur de la minéralisation, en montrant qu'il n'est pas nécessaire de connaître la variabilité de la dispersion pour chaque bactérie, du moins dans un système à symétrie radiale.

III.3.3. Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat

Comme mentionné dans la section III.1.2-2.3 et éprouvé dans le matériel supplémentaire (section III.1.2-**Fig. S5**), les bactéries et le substrat ont été considérés comme étant dispersés par advection à la même vitesse par le même processus. Néanmoins, par soucis de simplification des messages et conclusions issues des résultats, il a été conjecturé que l'impact de la dispersion par advection se résumait essentiellement à la dispersion des bactéries, étant donné que la dispersion du substrat par advection joue un rôle mineur comparé à la dispersion du substrat par diffusion.

La sensibilité de ce postulat a été vérifiée sur l'ensemble du criblage, en simulant le traitement colocalisé en percolation sans dispersion hydrodynamique du substrat. Comme le montre la **Figure III.19**, l'absence de dispersion hydrodynamique des bactéries joue un rôle mineur sur les minéralisations finales et l'optimum de dispersion des bactéries dans les modèles calibrés sur les données expérimentales, à la fois pour le modèle de Monod (**Figure III.19A et B**) et pour le modèle de Contois (**Figure III.19C et D**).

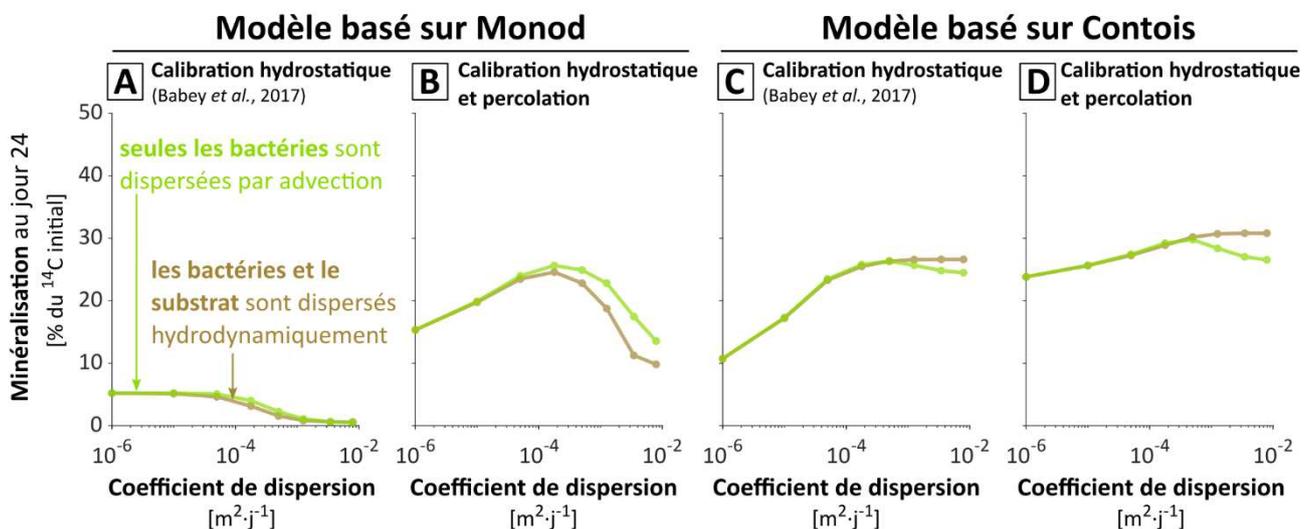


Figure III.19. Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour le traitement colocalisé en percolation. Deux modalités de dispersion sont testées : les résultats avec dispersion hydrodynamique du substrat sont indiqués en marron, tandis que ceux sans dispersion du substrat sont indiqués en vert. Les résultats sont représentés pour les modèles de Monod (**A-B**) et de Contois (**C-D**) calibrés sur les traitements hydrostatiques seuls (**A et C**), ou sur les traitements hydrostatiques et en percolation (**B et D**).

La figure **Figure III.20** montre cependant que sur l'ensemble du criblage, la dispersion hydrodynamique du substrat peut entraîner un fort effet sur les cinétiques du traitement colocalisé en percolation, qui se traduit par une importante augmentation de l'inadéquation avec les données expérimentales pour certains jeux de paramètres (**Figure III.20A**, points au-dessus de la diagonale). Ces jeux de paramètres combinent de fortes efficacités maximales d'absorption et de fortes vitesses maximales de croissance, menant à des situations où les bactéries sont très efficaces et auraient donc intérêt à se disperser plus rapidement que le substrat ne diffuse (explications détaillées dans la section IV.2). Plus précisément, ces jeux de paramètres pour lesquels l'impact de la dispersion hydrodynamique du substrat est le plus marqué correspondent à des simulations qui ne sont pas du tout en adéquation avec les données expérimentales sur les traitements sans percolation. En effet, pour les 10% des jeux de paramètres possédant les meilleures adéquations J_{12} (voir éq. (15) de la section III.1.2-2.5) avec les données expérimentales sur les traitements hydrostatiques, l'impact de la dispersion hydrodynamique du substrat est beaucoup plus limité (**Figure III.20B**), voire améliore l'adéquation avec les données, comme le montre la proximité des points verts avec la diagonale et l'absence de points au-dessus de la diagonale.

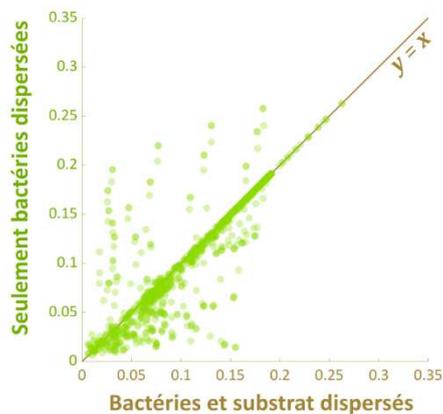
Les conclusions sont les mêmes pour le modèle de Contois (**Figure III.21**). La dispersion hydrodynamique du substrat joue un rôle minime sur les cinétiques de minéralisation. En outre, on observe que l'absence de dispersion hydrodynamique du substrat ne fait qu'améliorer l'adéquation avec les données expérimentales.

Ces résultats confirment que la dispersion hydrodynamique du substrat n'est pas un processus déterminant et qu'il est raisonnable de négliger cet élément lors de l'interprétation des résultats.

Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Monod

(hétérogène en percolation)

A Criblage complet



B 10% des jeux de paramètres biologiques les mieux en adéquation avec les traitements hydrostatiques

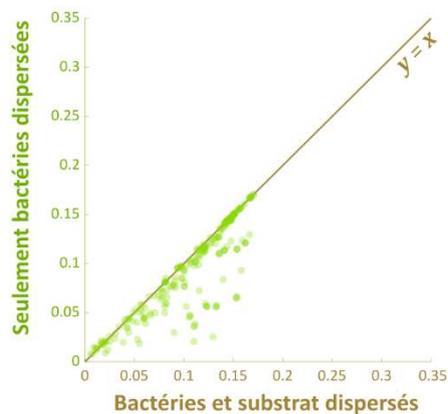
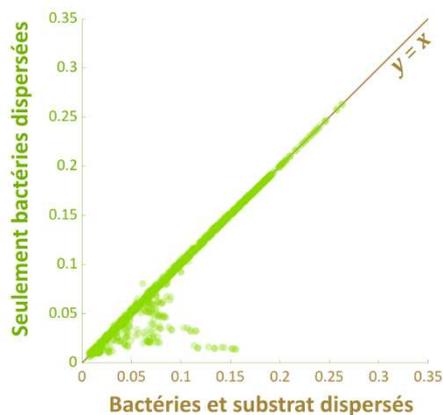


Figure III.20. Capacité prédictive du modèle de Monod pour le traitement colocalisé en percolation, selon la présence (axe marron des abscisses) ou l'absence (axe vert des ordonnées) de dispersion hydrodynamique du substrat. Le panneau gauche (A) montre l'ensemble des 2401 jeux de paramètres biologiques explorés, tandis que le panneau droit (B) montre les jeux de paramètres biologiques présentant les 10% de modèles présentant les meilleures adéquations avec les résultats expérimentaux des traitements hydrostatiques.

Inadéquations J_4 - Modèle basé sur Contois

(hétérogène en percolation)

A Criblage complet



B 10% des jeux de paramètres biologiques les mieux en adéquation avec les traitements hydrostatiques

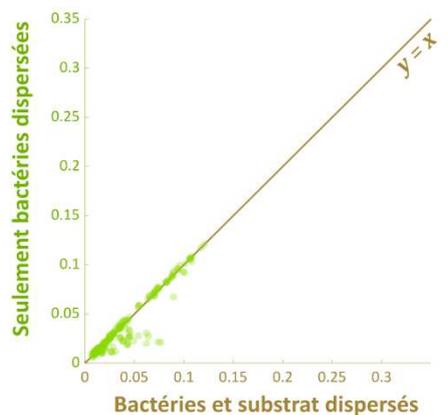


Figure III.21. Capacité prédictive du modèle de Contois pour le traitement colocalisé en percolation, selon la présence (axe marron) ou l'absence (axe vert) de dispersion hydrodynamique du substrat. Le panneau gauche (A) montre l'ensemble des 2401 jeux de paramètres biologiques explorés, tandis que le panneau droit (B) montre les jeux de paramètres biologiques présentant les 10% des modèles présentant les meilleures adéquations avec les résultats expérimentaux des traitements hydrostatiques.

III.3.4. Répartitions spatiales des bactéries et du substrat

La répartition spatiale des bactéries et du substrat dans l'expérience colocalisé en percolation après 24 jours d'incubation est donnée dans la **Figure II.8** de la section II.2.2.2. L'importance de la composante verticale du déplacement du substrat et des bactéries par percolation y est discutée. Dans cette section, les répartitions spatiales simulées sont présentées et discutées au regard des répartitions expérimentales.

La **Figure III.22** montre les répartitions spatiales finales du substrat et des bactéries simulées avec le modèle de Monod reproduisant au mieux les données de minéralisation. Plusieurs remarques ressortent de la comparaison avec les données expérimentales présentées **Figure II.8**. D'une part, la densité moyenne de dégradeurs du 2,4-D est 2× moins importante dans le modèle que dans les mesures de gène *tfdA*. Cet écart est admissible étant donné l'incertitude pouvant exister dans les mesures de gène *tfdA* (Bælum et al., 2006, 2008). La densité initiale de bactéries calibrée était également 5× plus faible que mesurée expérimentalement. Dans le modèle de Monod, il est en effet nécessaire d'avoir une densité initiale relativement basse de bactéries de manière à compenser la haute efficacité maximale d'absorption qui est requise pour reproduire la minéralisation observée. Au-delà de la densité moyenne, les densités de bactéries mesurées expérimentalement admettent des valeurs beaucoup plus hautes à proximité de la position initiale des bactéries, en particulier à la verticale de la position initiale. Cela montre que les mécanismes de dispersion des bactéries sont vraisemblablement trop complexes pour être rigoureusement décrits par une dispersion simple isotrope (Murphy and Ginn, 2000). Cet aspect semble moins marqué avec le modèle de Contois calibré en hydrostatique et percolation, probablement du fait d'une dispersion optimale moindre et d'une dynamique de population différente (**Figure III.23A**).

Expérience hétérogène colocalisée en percolation

après 24 jours

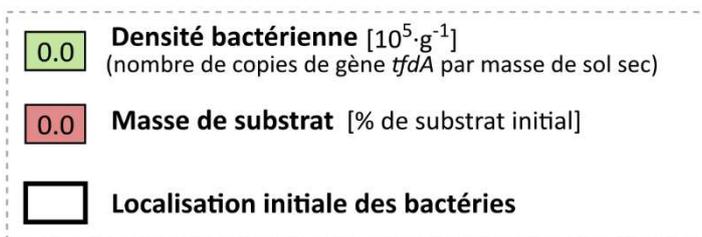
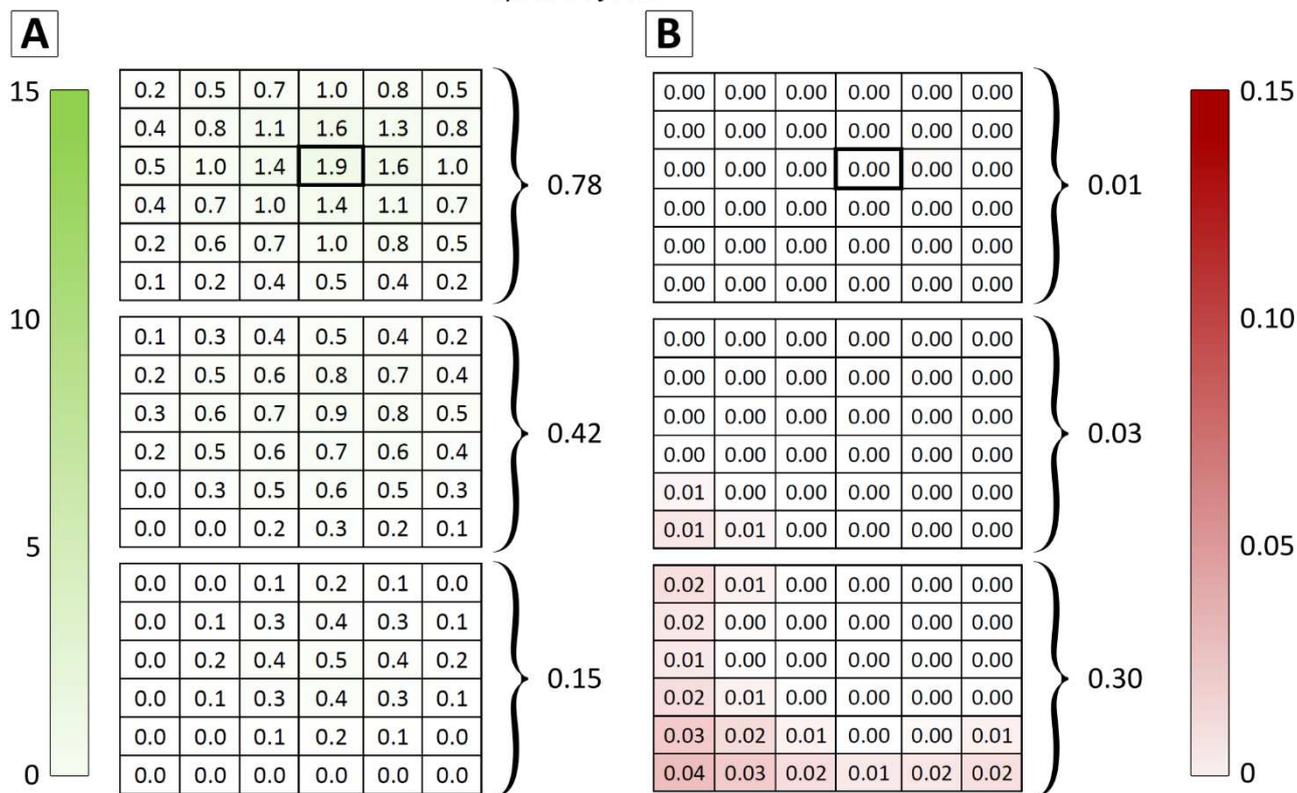


Figure III.22. Carte de répartition spatiale des densités en bactéries (A) et des concentrations en substrat (B) avec le modèle de Monod calibré en hydrostatique et en percolation, pour l'expérience « colocalisé ». Le temps correspond à la fin des expériences (24 jours). Les valeurs indiquées à droite des cartes représentent les densités moyennes par couche (A) ou la masse totale de substrat par couche exprimée en % de la masse initiale (B), respectivement.

D'autre part, une différence majeure vient de la répartition du substrat. Les concentrations résiduelles en substrat dissout après 24 jours d'incubation sont en effet beaucoup plus faibles dans les simulations que dans les expériences (**Figure III.22B** et **Figure III.23B**). En conséquence, la répartition du substrat dans les simulations est dominée par la dégradation, et suit donc un gradient inverse à celui des bactéries, contrairement aux mesures expérimentales. Cela traduit potentiellement un mécanisme de « protection » du substrat dissout contre la dégradation, à une échelle plus petite que l'échelle de résolution spatiale des mesures (mm). On peut en effet supposer que des processus physico-chimiques micrométriques conduisent à la « préservation » d'une fraction du substrat, qui resterait ainsi

toujours présente à la fin des expériences suivant une répartition peu impactée par les bactéries.

Expérience hétérogène colocalisée en percolation

après 24 jours

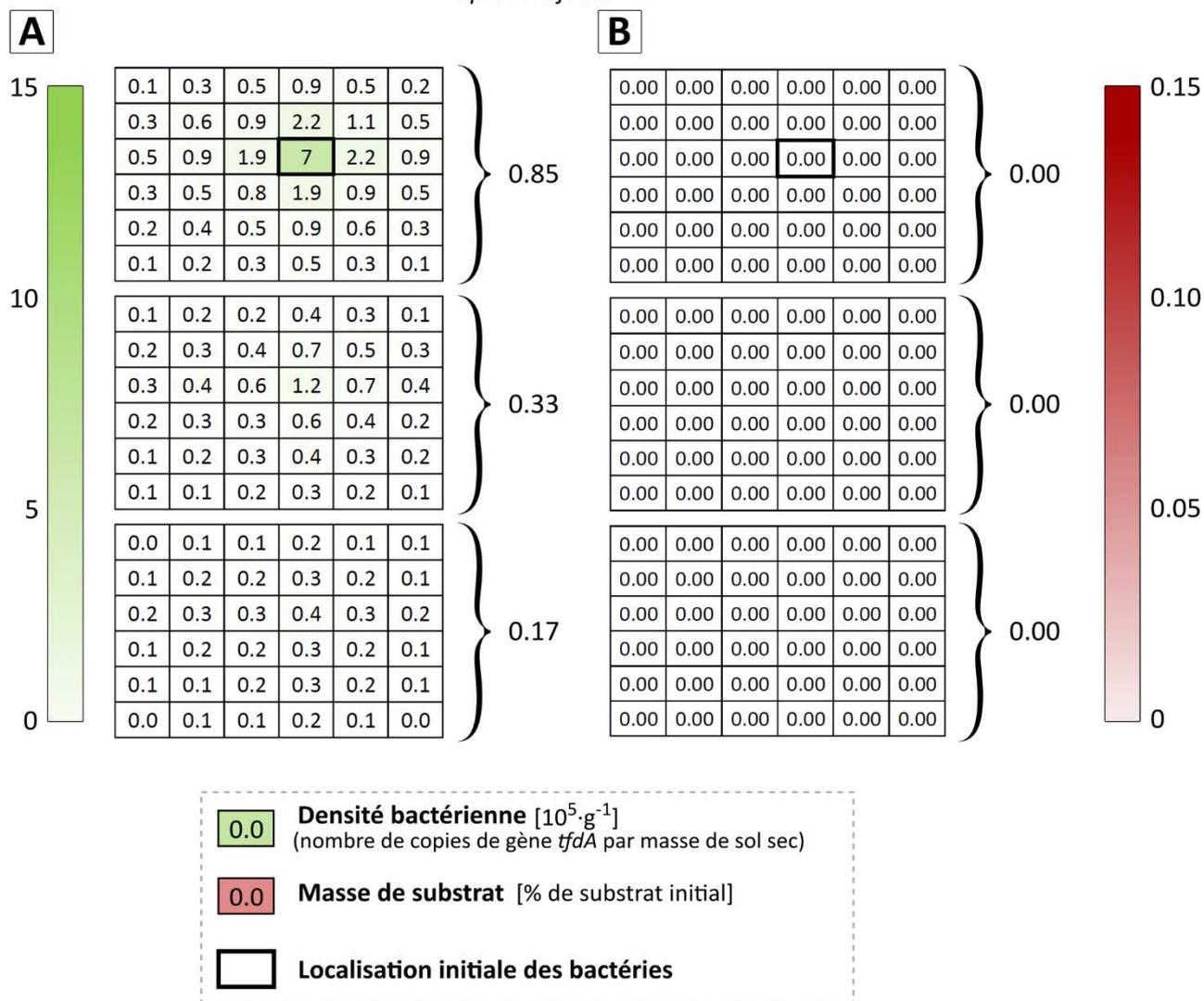


Figure III.23. Carte de répartition spatiale des densités en bactéries (A) et des concentrations en substrat (B) avec le modèle de Contois calibré en hydrostatique et en percolation, pour l'expérience « colocalisé ». Pour les légendes, se référer à la **Figure III.22**.

Points clés

► Les postulats utilisés pour simplifier le modèle de transport, à savoir le découplage entre l'advection et la dispersion, l'isotropie de la dispersion et le rôle négligeable de la dispersion du substrat, n'impactent pas significativement la nature des résultats et des messages.

III.4. Compléments sur la ratio-dépendance

La pertinence de modéliser l'activité des bactéries du sol par un modèle de ratio-dépendance a été discutée dans la section III.1.2-4.2. La présente section se propose de fournir un complément de discussion sur ce point.

A l'instar du modèle de Monod, le modèle ratio-dépendant de Contois est un modèle empirique basé sur l'adéquation aux données expérimentales. De nombreux travaux ont tenté d'apporter une explication mécaniste au modèle de Contois. Ces travaux impliquent souvent des limitations par des processus de surface, en particulier liés à du substrat insoluble (Nelson and Holder, 2009). Vavilin et al. (1996) ont par exemple développé un modèle où les bactéries dégradantes colonisent tout d'abord les surfaces de particules de substrat avant de les dégrader. Il en résulte un comportement qui se rapproche du modèle de Contois, à savoir que lorsque les bactéries sont très peu denses (beaucoup de surface par rapport aux bactéries), la dégradation suit une tendance exponentielle, mais dès lors que les bactéries sont denses, la dégradation suit une cinétique de 1^{er} ordre. De manière similaire, Wang and Li (2014) ont montré que le modèle de Contois décrivait de manière satisfaisante la dégradation de substrat insoluble à la surface duquel les bactéries s'attachent et obstruent la croissance des bactéries planctoniques¹ environnantes. Lorsque les bactéries sont très peu denses par rapport aux surfaces colonisables, le modèle devient équivalent au modèle de Monod. Dans ces situations, les fortes densités bactériennes, relativement au substrat, défavorisent l'activité individuelle moyenne des bactéries, assimilable à une compétition bactérienne pour le substrat (Lobry and Harmand, 2006; Harmand and Godon, 2007; Krichen et al., 2018) ce qui conduit à un modèle de croissance qui dépend du ratio entre concentration de substrat et densité de bactéries.

Pour rappel, le terme de « compétition pour le substrat » est utilisé ici pour décrire les déséquilibres spatiaux de concurrence entre bactéries ayant pour effet de réduire la minéralisation globale, tel que défini au début de la section III.2.1.

III.4.1. Originalité de la ratio-dépendance dans les sols

Les résultats présents se démarquent sur plusieurs points. Le rôle des processus de surface et de l'attachement des bactéries aux surfaces est une caractéristique très pertinente du sol. Cependant, la section III.1.2-4.1.1 dépasse ce cadre-là et montre que la ratio-dépendance peut s'appliquer pour des bactéries planctoniques dégradant un substrat dissout, pourvu qu'elles soient oligotrophes. De plus, la ratio-dépendance peut ici s'appliquer pour des densités bactériennes beaucoup plus faibles qu'habituellement (sections III.1.2-4.1.1 et III.2.2).

¹ Planctonique = bactéries en solution, par opposition aux bactéries attachées aux surfaces

En revanche, les résultats précédents montrent également que la spatialisation du modèle de Monod permet déjà de prendre en compte la compétition locale pour le substrat et de rendre compte de manière satisfaisante des données expérimentales sans avoir nécessairement besoin de recourir à un modèle ratio-dépendant. Cela soulève deux questions : [1] De quelles manières les modèles de Monod et de Contois rendent-ils compte de la compétition pour le substrat ? [2] Quels facteurs peuvent expliquer ces différences ?

III.4.2. Unification de la compétition modélisée par les modèles de Monod et de Contois

Comme vu dans la section III.1.2-3.2.2, la compétition pour le substrat induite par une densité localement trop importante de bactéries limite la minéralisation dès lors qu'il y a une opposition entre le gradient de concentrations en substrat et le gradient de densités bactériennes, voire une déplétion du substrat à l'endroit où se trouvent les plus hautes densités bactériennes. Pour obtenir cette situation, il faut que la proportion de substrat dégradé à chaque instant soit plus forte dans la zone à haute concentration en substrat que dans la zone à basse concentration en substrat. Cela survient lorsque les bactéries sont plus nombreuses là où le substrat est le plus concentré. L'effet de ce gradient de densité bactérienne est exacerbé par l'efficacité maximale des bactéries.

Si l'on considère à présent le modèle de Contois, qu'on ne prenne pas en compte de terme d'accommodation, qu'on néglige les effets de discrétisation spatiale (la densité bactérienne est non-nulle en tout point de l'espace), et qu'on considère que les bactéries soient en excès par rapport au substrat, on peut alors assimiler la vitesse spécifique de croissance du modèle de Contois à un terme proportionnel au ratio S/B :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{S + B \kappa_C} \approx \frac{\mu_{max}}{\kappa_C} \frac{S}{B} \quad \text{lorsque } S \ll \kappa_C B \quad \text{Éq 22}$$

avec S la concentration en substrat, B la densité en bactéries, μ_{max} la vitesse maximale de croissance et κ_C la constante de Contois. La dynamique de dégradation du substrat, en proportion du substrat présent, s'exprime de manière générale sous la forme suivante :

$$\frac{dS}{S dt} = -\frac{\mu B}{y S} = -\frac{\mu_{max}}{y} \frac{S}{S + B \kappa_C} \frac{B}{S} \quad \text{Éq 23a}$$

$$\text{s'écrivant également } \frac{dS}{S dt} = -\frac{\mu_{max}}{y} \frac{1}{\frac{S}{B} + \kappa_C} \quad \text{Éq 23b}$$

et peut alors être approximée par l'expression suivante :

$$\frac{dS}{S dt} \approx \frac{\mu_{max}}{y \kappa_C} \quad \text{lorsque } S \ll \kappa_C B \quad \text{Éq 24}$$

avec y le rendement de croissance. La dégradation du substrat ne varie plus qu'en proportion de la concentration en substrat. Il ne peut ainsi pas survenir d'inversion de gradient de substrat, contrairement au modèle de Monod. Les bactéries ne peuvent pas non plus épuiser

le substrat localement, car même nombreuses, leur nombre fait baisser leur efficacité. Dans ce cadre-là, l'effet négatif de la densité sur l'activité, qu'on peut qualifier de compétition pour le substrat, ne prend ainsi pas la forme d'une inversion de gradient de substrat comme avec Monod, ponctuelle dans le temps, mais est remplacée par la ratio-dépendance de l'activité bactérienne μ , qui agit de manière permanente. Ce cas de figure conduit à une indépendance stricte entre la minéralisation et la dispersion, telle qu'évoquée dans la section III.1.2-3.3 (et approchée par la courbe bleue de la **Fig. 8**).

Il est néanmoins possible d'observer une inversion de gradient de substrat avec un modèle de Contois, dont l'effet vient alors se cumuler à celui de la ratio-dépendance. Cette inversion de gradient peut provenir de trois facteurs. D'une part, la présence d'un délai d'accommodation, découplant dans le temps l'activité bactérienne et la concentration perçue en substrat, peut conduire à un gradient spatial d'activité spécifique bactérienne non corrélé au gradient de substrat. Deuxièmement, les effets de discrétisation spatiale, tels que l'absence totale de bactéries dans certaines zones, peuvent permettre l'inversion du gradient de concentration en substrat. Ce point devient capital lorsque l'on étudie les processus à une résolution proche de l'échelle micrométrique des bactéries. Troisièmement, dès lors que la densité en bactéries n'est pas en excès par rapport à la concentration en substrat, la simplification décrite dans l'Éq 22 n'a plus lieu d'être. Le ratio S/B (concentration en substrat sur densité en bactéries) influe alors sur la dégradation, comme cela apparaît dans l'Éq 23b, et lorsqu'il augmente jusqu'à ce que la concentration en substrat soit en excès par rapport à la densité bactérienne, on peut alors approximer la proportion de dégradation par l'expression :

$$\frac{dS}{S dt} \approx -\frac{\mu_{max}}{y} \frac{B}{S} \quad \text{lorsque } S \gg \kappa_c B \quad \text{Éq 25}$$

La dégradation dépend ici du ratio B/S , à l'opposé de l'Éq 24. De manière similaire au rôle limitant de la saturation par S décrit à la section II.4.2.1, la concavité vers le bas de la relation de Contois en fonction du ratio S/B induit une « saturation » de la vitesse d'absorption μ/y par S/B . Cela conduit à une plus faible proportion de substrat dégradée lorsque S/B est grand.

Le cas de figure où la concentration en substrat est plutôt en excès par rapport aux bactéries est détaillé sur la **Figure III.24**. Tant que le gradient de densité en bactéries suit le gradient de concentration en substrat, le taux de dégradation du substrat (vitesse de dégradation exprimée en fonction de la concentration en substrat) reste constant (**A** et **B**). Dès lors qu'il existe une « divergence » entre la répartition des bactéries et celle du substrat, la dégradation bactérienne peut accentuer le gradient de substrat (**C**) ou engendrer une inversion du gradient de substrat (**D**). Cette inversion du gradient de substrat a été observée sur certaines simulations et, bien qu'elle reste limitée par rapport aux inversions de gradient observées avec le modèle de Monod, elle impacte significativement la minéralisation, favorisant les fortes dispersions qui homogénéisent les bactéries et le substrat. La

Figure III.25 montre que les jeux de paramètres pour lesquels la minéralisation est limitée lorsque la dispersion est faible, malgré un modèle de Contois, correspondent plutôt à des petites valeurs des paramètres κ_C et μ_{max}/y , ce qui s'explique par le fait que les faibles κ_C et μ_{max}/y favorisent les situations où $S \gg \kappa_C B$.

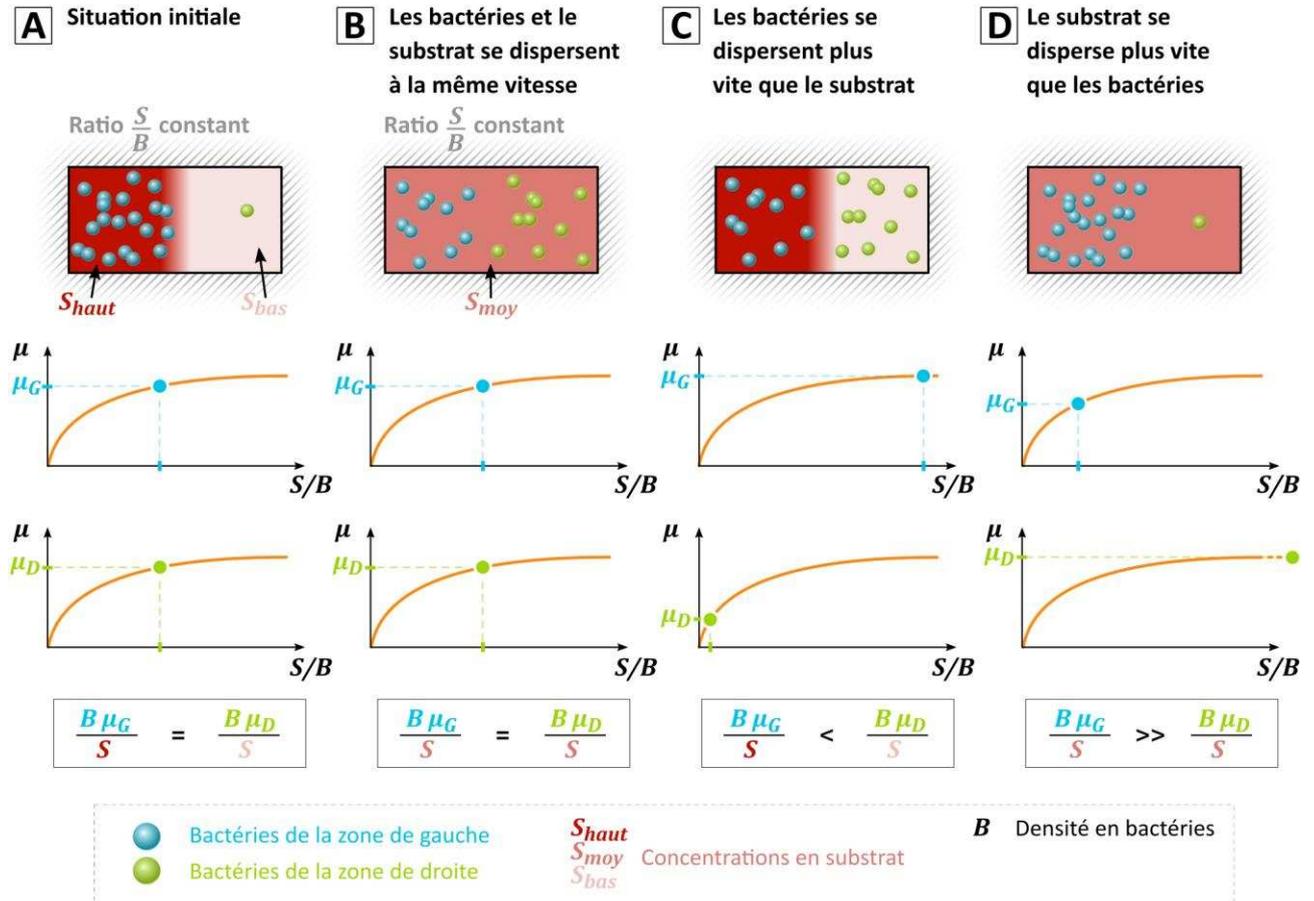


Figure III.24. Impact de la concavité vers le bas de la relation de Contois dans différentes situations. Les bactéries sont représentées par les sphères, de couleur bleue ou verte selon qu'elles se trouvent dans la partie gauche ou droite du système. Le substrat est représenté en rouge. Le schéma (A) représente la situation d'origine dans laquelle le substrat et les bactéries sont concentrés principalement dans la zone de gauche. Les schémas (B), (C) et (D) représentent trois situations postérieures, selon que les bactéries se dispersent aussi vite que le substrat, plus vite ou moins vite, respectivement. L'activité spécifique de chacune des bactéries vaut μ . La dégradation du substrat, en proportion, $(1/S) \cdot dS/dt$ est égale au produit de la densité bactérienne B et de la vitesse de croissance μ , normalisé par la concentration en substrat S , à un facteur y près. Les encarts en dessous des graphiques comparent la dégradation du substrat (en proportion) entre les zones de gauche et les zones de droite.

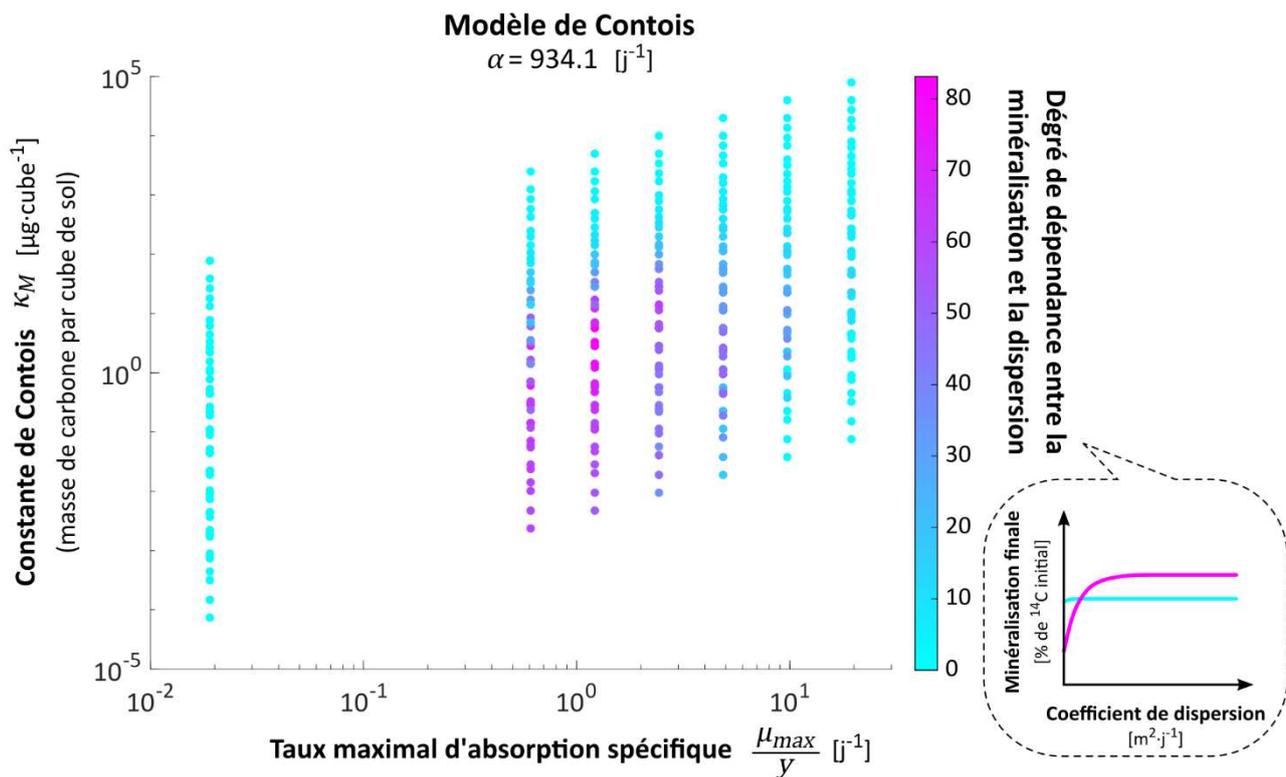


Figure III.25. Dépendance de la minéralisation au jour 24 envers le coefficient de dispersion, en fonction de la vitesse maximale d'absorption spécifique et de la constante de Contois. Les résultats sont représentés pour les jeux de paramètres avec un délai d'accommodation négligeable ($\alpha = 934.1 \text{ j}^{-1}$). Pour éviter les effets de discrétisation spatiale, la dispersion nulle ($d_{disp} = 0$) est exclue. Le degré de dépendance entre la minéralisation et la dispersion traduit la forme de la relation entre ces deux paramètres, telle que décrite dans le médaillon en bas à droite.

III.4.3. Interrogations futures sur l'apport explicatif du modèle de Contois

La meilleure capacité du modèle de Contois à reproduire les données expérimentales, décrite dans la section III.1.2-3.3, provient en grande partie de la cinétique de minéralisation de forme moins « exponentielle ». La forme exacte de la cinétique de minéralisation expérimentale reste cependant sujet à caution (voir section II.2.3). Le caractère plus « linéaire » de la minéralisation avec le modèle de Contois résulte de la régulation directe de l'activité des bactéries par leur densité. En ce sens, le modèle de Contois répartit dans le temps (« lisse ») la compétition entre bactéries, par rapport au modèle de Monod où la compétition s'exprime de manière plus soudaine. La compétition dépend fondamentalement des densités bactériennes locales, c'est-à-dire à l'échelle micrométrique. De manière hypothétique, on peut émettre l'idée que les colonies de 20 cellules entrent en compétition plus tôt que les colonies de 10 cellules, qui elles-mêmes entrent en compétition plus tôt que les agglomérats de 3 cellules. On peut alors faire l'hypothèse que le modèle de Contois permette de mieux rendre compte de cette hétérogénéité spatiale de répartition des bactéries à une échelle inférieure à la résolution du modèle spatial. Il serait intéressant

d'étudier si la prise en compte explicite de l'hétérogénéité spatiale des bactéries à l'échelle micrométrique, associé à un modèle bactérien substrat-dépendant, pourrait conduire à un « étalement » dans le temps de l'expression de la compétition similaire à ce qu'on observe avec un modèle de Contois macroscopique.

Points clés

- ▶ Avec un modèle de Monod, la compétition pour le substrat entre bactéries prend la forme d'une inversion de gradient de substrat, voire d'un épuisement local du substrat. ▶ Avec un modèle de Contois, la compétition prend principalement la forme de la ratio-dépendance, mais peut également apparaître sous forme d'une inversion de gradient, néanmoins plus minime qu'avec un modèle de Monod
- ▶ Le choix entre ces deux types de compétition peut se faire sur leur caractère temporel, la première étant ponctuelle tandis que la deuxième est permanente. Cette différence impacte la forme de la cinétique de minéralisation, notamment la vitesse maximale de minéralisation globale.

Résumé du chapitre III

Bien que le modèle développé dans ce travail soit une représentation simplifiée d'un nombre réduit de mécanismes, il contient plusieurs éléments guidant la compréhension des sols réels.

En premier lieu, le rôle de la répartition spatiale des bactéries et des substrats sur la minéralisation est indissociable de l'efficacité maximale d'absorption des bactéries. L'activité des dégradeurs bactériens au sein d'une population est régulée par un équilibre entre la dilution du substrat et la compétition entre bactéries. L'efficacité maximale d'absorption module cet équilibre, qui à son tour détermine l'impact des répartitions spatiales sur la minéralisation. Au vu de l'importance des traits bactériens pour comprendre le rôle des répartitions spatiales sur la minéralisation, il apparaît que leur prise en compte permettrait de révéler de nouvelles relations et de nouveaux descripteurs de la minéralisation dans les sols. Les avancées récentes cherchant à relier la diversité biologique des bactéries du sol et leurs traits d'activité est très prometteuse. Certains travaux en cours (Marschmann et al., 2019) posent les bases d'un cadre montrant les correspondances entre la phylogénie des bactéries, la mesure métagénomique des gènes, les traits bactériens et les préférences d'environnement.

Plusieurs points mis en évidence dans cette thèse convergent vers l'idée que la compétition locale entre bactéries éparses du sol joue un rôle déterminant quant à la minéralisation, contrairement à la compétition entre espèces. Pour échapper à la compétition entre individus, les bactéries oligotrophes, fréquentes dans le sol nu, ont un grand intérêt à rester éloignées les unes des autres, de l'ordre de plusieurs dizaines de μm , dès lors qu'elles consomment le même substrat.

Le modèle de Monod et le modèle de Contois, à condition d'être spatialement explicites, permettent tous deux de rendre compte de la compétition entre bactéries, mais d'une manière différente.

Les microbes construisent les plantes, les animaux, les sociétés, les civilisations...

— Marc-André Sélosse

IV Généralisations

Ce chapitre présente les principaux résultats postérieurs à la publication présentée au début du chapitre précédent, et qui ont pu être regroupés sous l'objectif commun de généraliser les résultats précédents à des échelles ou à des systèmes différents. La première section s'intéresse aux aspects temporels de l'équilibre entre compétition bactérienne et dilution du substrat. La deuxième section étudie l'introduction de la vitesse de diffusion du substrat dans cette relation. La troisième section cherche à déterminer les relations analytiques sous-jacentes à cet équilibre. La dernière section explore les relations entre compétition bactérienne et dilution du substrat dans d'autres configurations spatiales.

IV.1. Temporalité de l'optimum de dispersion

Comme présenté dans la contribution de la partie III.1.2, le criblage du coefficient de dispersion d_{disp} rend possible le calcul d'une grandeur de modélisation nommée « optimum de dispersion » correspondant à la valeur du coefficient de dispersion conduisant à la plus haute minéralisation du substrat. Cette valeur optimale de dispersion dépend du modèle (modèle de Monod ou de Contois) et du jeu de paramètres biologiques, mais également du temps. En effet, la dispersion qui conduit à la plus haute minéralisation aux temps courts n'est pas nécessairement la même que la dispersion qui conduit à la plus haute minéralisation aux temps longs. L'aspect temporel ayant été abordé de manière succincte dans la partie III.1.2, il est traité de manière approfondie ici, avec l'objectif sous-jacent de préciser les conditions d'extrapolation des résultats précédents à des échelles temporelles différentes

IV.1.1. Comportement temporel asymptotique de l'optimum de dispersion

Le double contrôle de la dégradation par la dilution du substrat et par la densité bactérienne repose sur les concentrations de substrat et de bactéries et dépend ainsi étroitement du

temps. L'équilibre entre ces deux contrôles, qui conditionne la position optimale des bactéries, est donc un équilibre dynamique. Il est dès lors important de déterminer à quel point la position optimale des bactéries, approximée dans le modèle par l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} , est dépendante du temps. En effet, l'échelle temporelle d'intérêt varie suivant les problématiques et les enjeux. Dans le cas du 2,4-D, lorsqu'il est formulé sous forme de solution et appliqué sur des parcelles cultivées, sa demi-vie est de l'ordre d'une à deux semaines (Merini et al., 2007). Néanmoins dans d'autres contextes et pour d'autres problématiques comme le devenir du carbone organique dans les sols, d'autres échelles de temps seront à considérer, en fonction des processus en jeu, comme par exemple la fréquence des apports ou des précipitations ou encore les caractéristiques biochimiques du sol et des populations microbiennes. A titre d'exemple, avec la calibration hydrostatique réalisée par Babey et al., (2017), 90% du substrat s'adsorbe irréversiblement en 178 jours, et 90% des bactéries meurent en 38 jours. Dans cette situation il n'apparaît pas pertinent d'étudier les dynamiques au-delà de quelques mois, alors que pour de nombreux processus de dégradation du carbone dans les sols, les cinétiques sont suffisamment lentes pour justifier de considérer les dynamiques annuelles (Chenu et al., 2017).

La **Figure IV.1** illustre la dynamique temporelle de l'optimum de dispersion pour quelques jeux de paramètres d'intérêt. Comme cela est visible sur la **Figure IV.1C,D,E**, l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} , représenté par un point, augmente avec le temps, mais finit toujours par converger vers une valeur finie de d_{disp} . Les exemples montrés sur la **Figure IV.1A,B,F** soulignent néanmoins que pour avoir des résultats robustes sur tous les jeux de paramètres biologiques considérés, il aurait fallu tester des dispersions inférieures à l'étalement initial du substrat et des bactéries dans un cube, et des dispersions plus élevées que $d_{disp} = 7.9 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$. Hormis ces situations-là, la convergence de l'optimum de dispersion est un résultat vérifié sur l'ensemble du criblage.

Les processus de dispersion réduisent les hétérogénéités spatiales en homogénéisant les concentrations, pendant que la métabolisation bactérienne (consommation de substrat et croissance microbienne) tend à augmenter les hétérogénéités spatiales. Néanmoins, lorsque la quantité de substrat disponible est plafonnée comme c'est le cas dans les expériences (apport initial ponctuel de substrat), il en résulte que la vitesse de croissance des bactéries $\mu(t)$ est également limitée dans le temps. Par conséquent, la densité bactérienne $B(t)$ est elle aussi limitée dans le temps. Le produit $\mu(t) \cdot B(t)$ est par conséquent lui aussi limité dans le temps. Comme vu dans le chapitre III, le produit $\mu(t) \cdot B(t)$ détermine directement la compétition locale entre bactéries pour le substrat. Ainsi, la dispersion optimale de ces dernières ne peut donc pas augmenter indéfiniment.

À cela s'ajoutent les phénomènes permanents de mort cellulaire et d'absorption irréversible qui tendent à défavoriser la dégradation sur les temps longs. Pour toutes les raisons énumérées ci-dessus, l'optimum de dispersion présente un comportement qui converge avec le temps, quelque soient les paramètres biologiques.

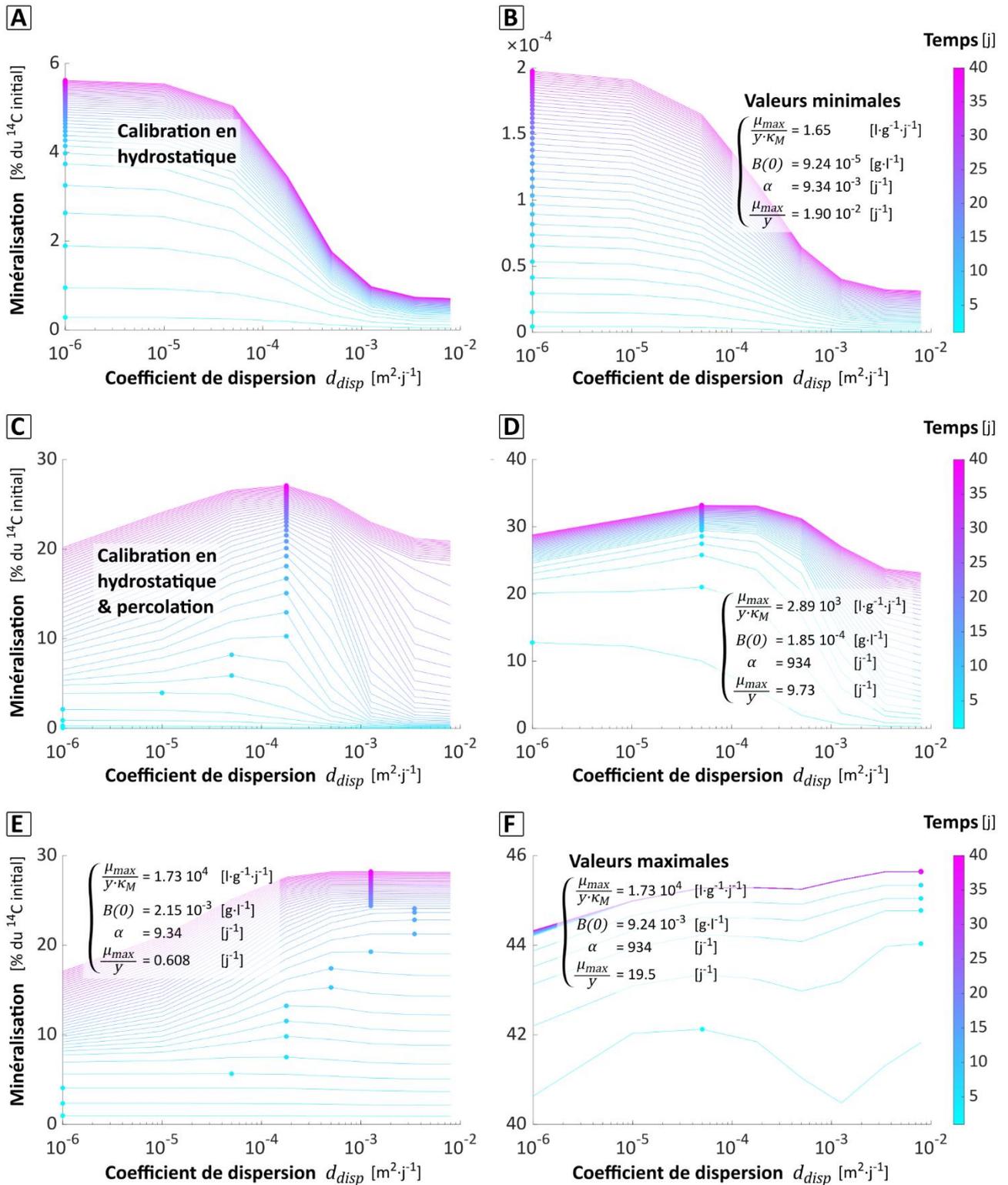


Figure IV.1. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Monod. Les relations sont montrées pour chaque jour, de 1 à 40, indiqués par l'échelle couleur. Six jeux de paramètres représentatifs du criblage et de sa diversité sont mis en avant dans les différents graphiques (A, B, C, D, E, F). Les dispersions nulle et infinie ne sont pas prises en compte.

IV.1.2. Comportement transitoire de l'optimum de dispersion

La **Figure IV.1E** montre un aspect peu courant dans le criblage, à savoir une dynamique temporelle non monotone de l'optimum de dispersion. Ce dernier augmente puis diminue partiellement au cours du temps. Plusieurs raisons pourraient expliquer ce comportement.

La diminution de l'optimum de dispersion au cours du temps semble disparaître lorsque les simulations sont effectuées dans un domaine plus vaste (**Figure IV.2**). Il est possible que ce phénomène soit donc un artefact dû aux limites spatiales du système. La discrétisation relativement grossière des valeurs criblées du coefficient de dispersion d_{disp} peut également être à l'origine d'une certaine instabilité de l'optimum de d_{disp} . En explorant le rôle des paramètres biologiques dans ce phénomène, il apparaît que l'instabilité de l'optimum de dispersion se limite aux paramétrisations qui incluent une valeur élevée d'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$ (**Figure IV.3**), sans que la raison n'ait pu être déterminée. On peut néanmoins supposer que les valeurs élevées de $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$ entraînent des optimums de dispersion élevés (comme décrit dans le chapitre III), et que plus les distributions sont étalées, plus les phénomènes liés aux limites spatiales du domaine deviennent critiques.

Toutefois, il faut noter que l'instabilité de l'optimum de dispersion apparaît uniquement dans des cas où plusieurs dispersions donnent des minéralisations très proches (courbes « aplaties »), et a donc un impact très limité sur les prédictions de dégradation.

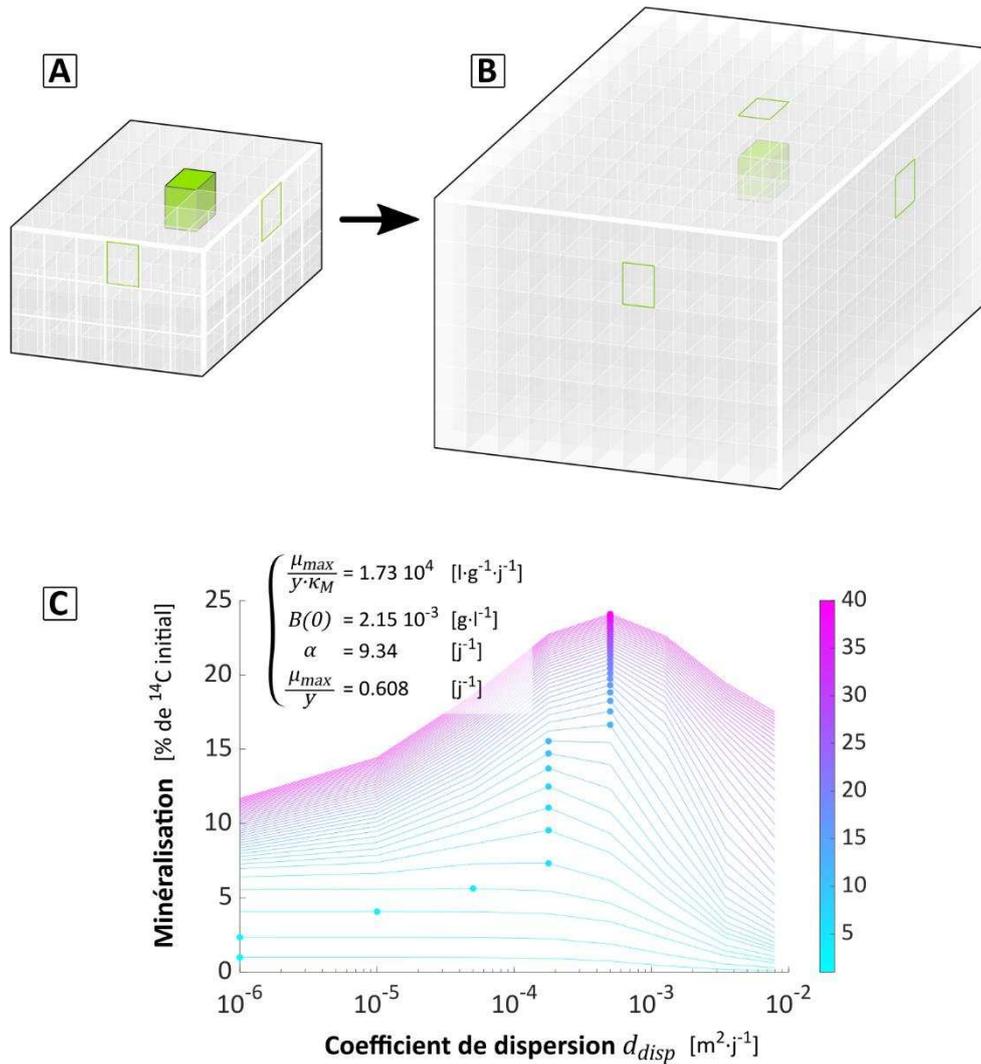


Figure IV.2. Effet de l'étendue du domaine spatial. Les distances entre le cube contenant initialement le substrat et les bactéries et les limites du domaine spatial sont augmentées. L'évolution de l'optimum de dispersion représenté sur la partie (C) correspond au jeu de paramètres de la **Figure IV.1E**. La diminution de l'optimum de dispersion entre les jours 15 et 16 disparaît.

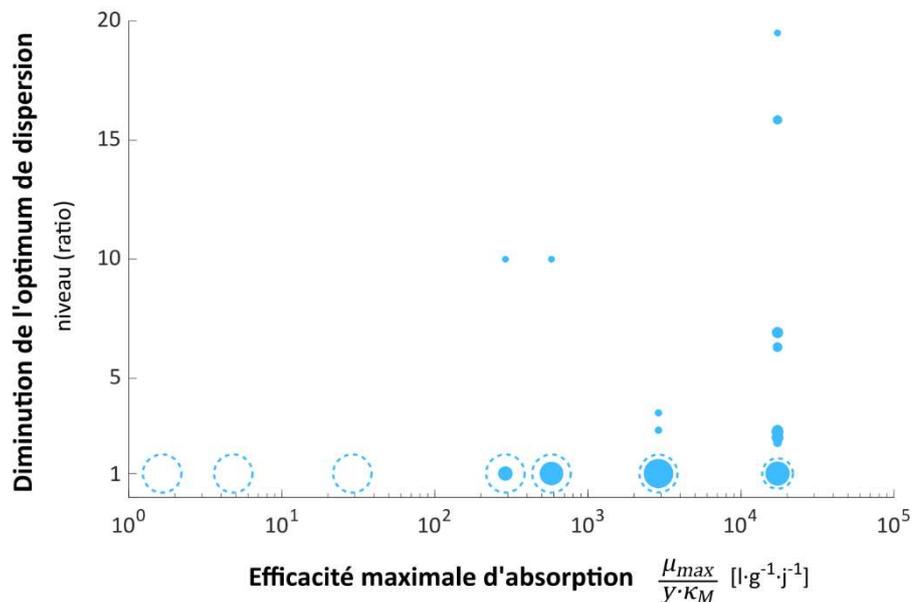


Figure IV.3. Effet de l'efficacité maximale d'absorption sur la rétrogradation temporelle de l'optimum de dispersion. La valeur la plus haute atteinte par l'optimum de dispersion est comparée à la valeur vers laquelle l'optimum de dispersion finit par converger quand le temps t tend vers l'infini. Le ratio des deux est indiqué sur l'axe Y. Un ratio unitaire indique que l'optimum de dispersion converge de manière monotone vers sa limite. Un ratio élevé (par exemple 19.5) indique qu'il existe un temps t pour lequel l'optimum de dispersion est 19.5× plus élevé que sa limite quand t tend vers l'infini. La taille des disques bleus indique le nombre de jeux de paramètres concernés. Les disques en pointillés représentent des jeux de paramètres pour lesquels les optimums de dispersion correspondent à l'absence de dispersion.

IV.1.3. Comparaison avec le modèle de Contois

A la différence des simulations réalisées avec le modèle de Monod, celles avec le modèle de Contois semblent montrer une relative indépendance de l'optimum de dispersion avec le temps (**Figure IV.4**). Cet effet est attendu, étant donné que, dans le modèle de Contois, aux faibles concentrations en substrat, le nombre de bactéries actives dans un volume donné de sol est exactement contrebalancé par la régulation de leur efficacité d'absorption par leur densité de population (III.4.2).

La relative indépendance de l'optimum de dispersion avec le temps sous Contois, comparativement à Monod, n'est pas visible de manière très évidente sur l'analyse systématique de l'ensemble de l'espace des paramètres du criblage (**Figure IV.5A**). La différence entre Monod et Contois devient plus marquée lorsque la lixiviation des bactéries n'est pas modélisée (**Figure IV.5B**) mais reste limitée, potentiellement à cause de l'importance des effets de saturation ainsi que de retard dus à la vitesse d'accommodation α .

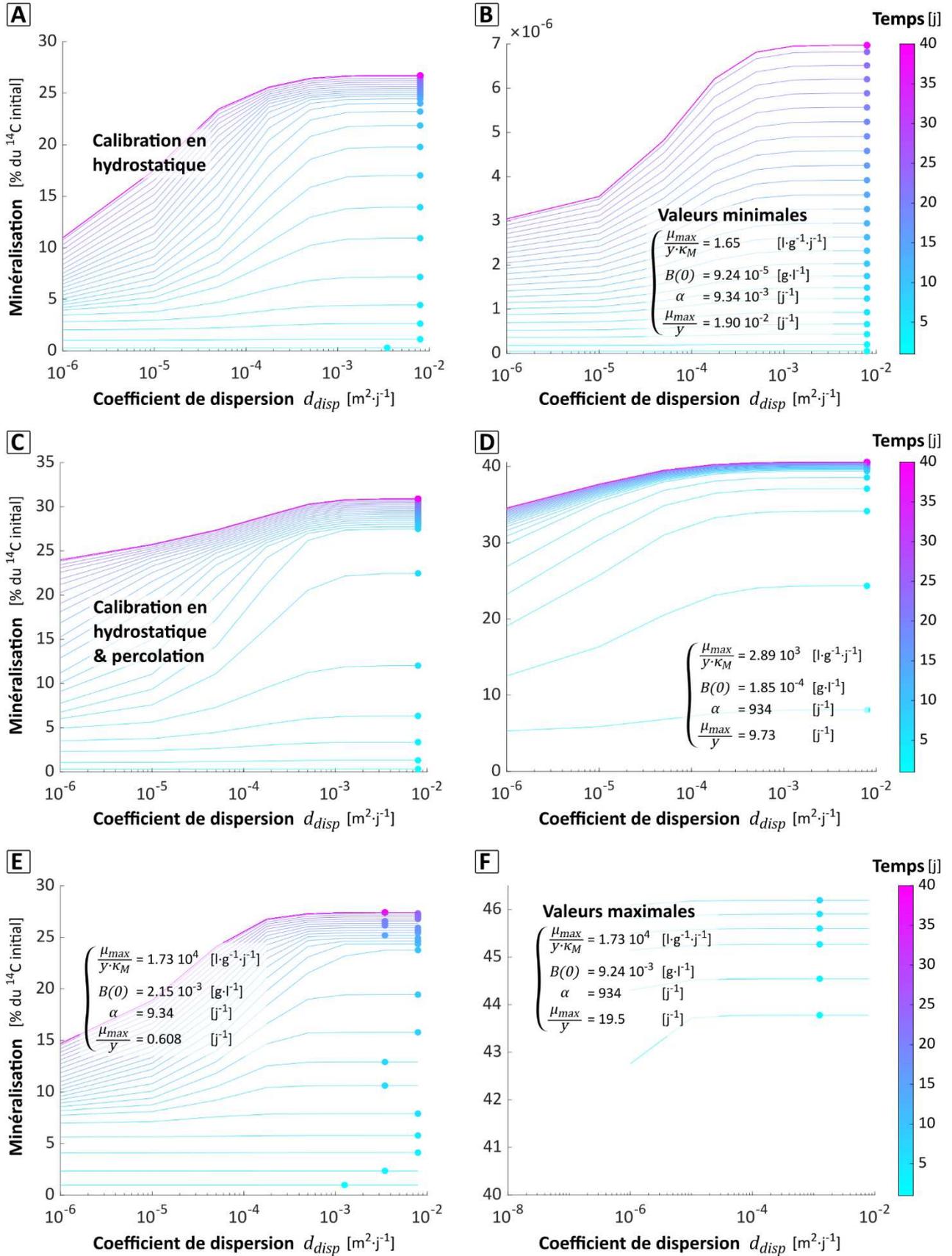


Figure IV.4. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Contois. Six jeux de paramètres représentatifs du criblage et de sa diversité sont mis

en avant dans les différents graphiques (A, B, C, D, E, F). Dans cette figure, les dispersions nulle et infinie ne sont pas prises en compte.

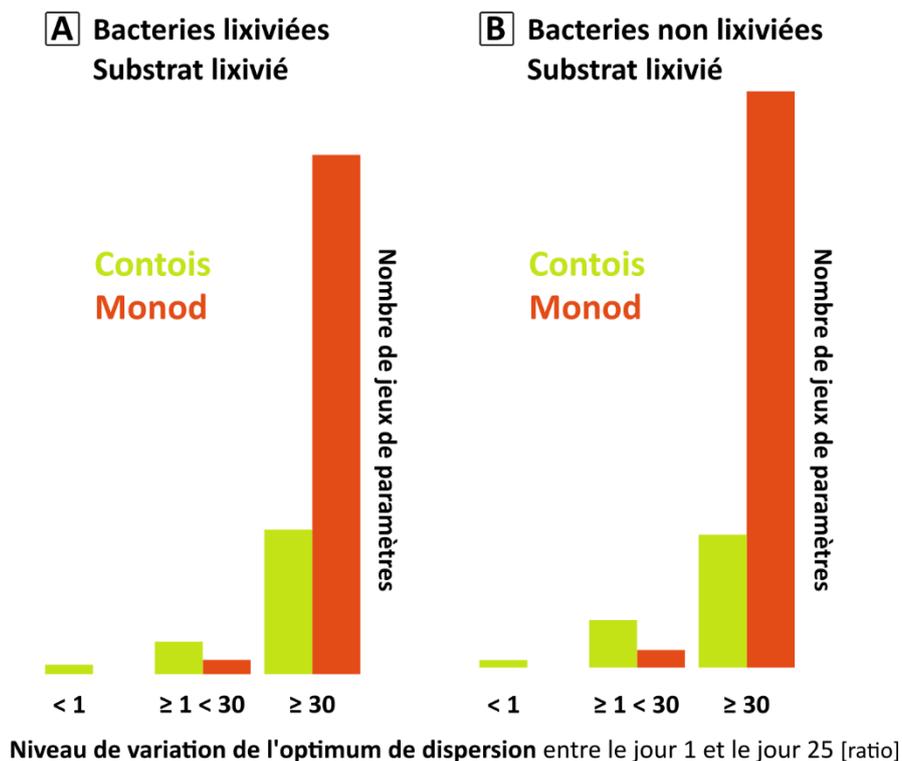


Figure IV.5. Variation temporelle de l'optimum de dispersion pour les modèles de Monod et de Contois, avec lixiviation des bactéries (A) et sans lixiviation des bactéries (B). La hauteur des barres indique le nombre de jeux de paramètres concernés. L'amplitude de la dynamique temporelle de l'optimum de dispersion est déterminée par le ratio entre l'optimum au dernier jour et l'optimum après un jour. Par soucis de lisibilité, les cas où l'optimum de dispersion est nul ou infini pour tout temps ne sont pas représentés, étant donné qu'ils correspondent vraisemblablement à des dynamiques d'optimum de dispersion qui sont en dehors de la gamme de dispersions criblées.

IV.1.4. Généralisation aux dispersions bactériennes continues de type diffusion

Afin d'analyser quantitativement la dynamique temporelle et la limite de l'optimum de dispersion, l'influence de la discrétisation des valeurs de dispersion criblées a été éprouvée. Le questionnement sous-jacent était le suivant : Peut-on trouver une modalité de dispersion, comme par exemple une dispersion continue, qui conduirait à un optimum de dispersion qui soit totalement indépendant du temps ? Pour avoir une réponse préliminaire à cette question, un nombre restreint de jeux de paramètres a été choisi pour simuler la minéralisation sans lixiviation et avec une dispersion continue des bactéries de type diffusive,

explorée sur 48 valeurs distribuées logarithmiquement allant de $d_{disp} = 1.4 \cdot 10^{-8}$ à $4.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$. Le substrat était quant-à-lui toujours soumis à la diffusion ($d_{diff} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$). Quatre jeux de paramètres biologiques ont été testés : les valeurs minimales, les valeurs maximales, la calibration hydrostatique et la calibration sur les expériences hydrostatique et percolation. Le même protocole a été appliqué au modèle de Monod et au modèle de Contois. Les résultats (**Figure IV.6**) montrent tout d'abord que l'optimum de dispersion reste dépendant du temps dans le cas du modèle de Monod. L'observation limitée de ces jeux de paramètres semble par ailleurs suggérer que l'optimum de dispersion des bactéries demeure majoritairement en-deçà du coefficient de diffusion du substrat, indiquant que la minéralisation est sub-optimale lorsque la dispersion des bactéries est plus rapide que celle du substrat.

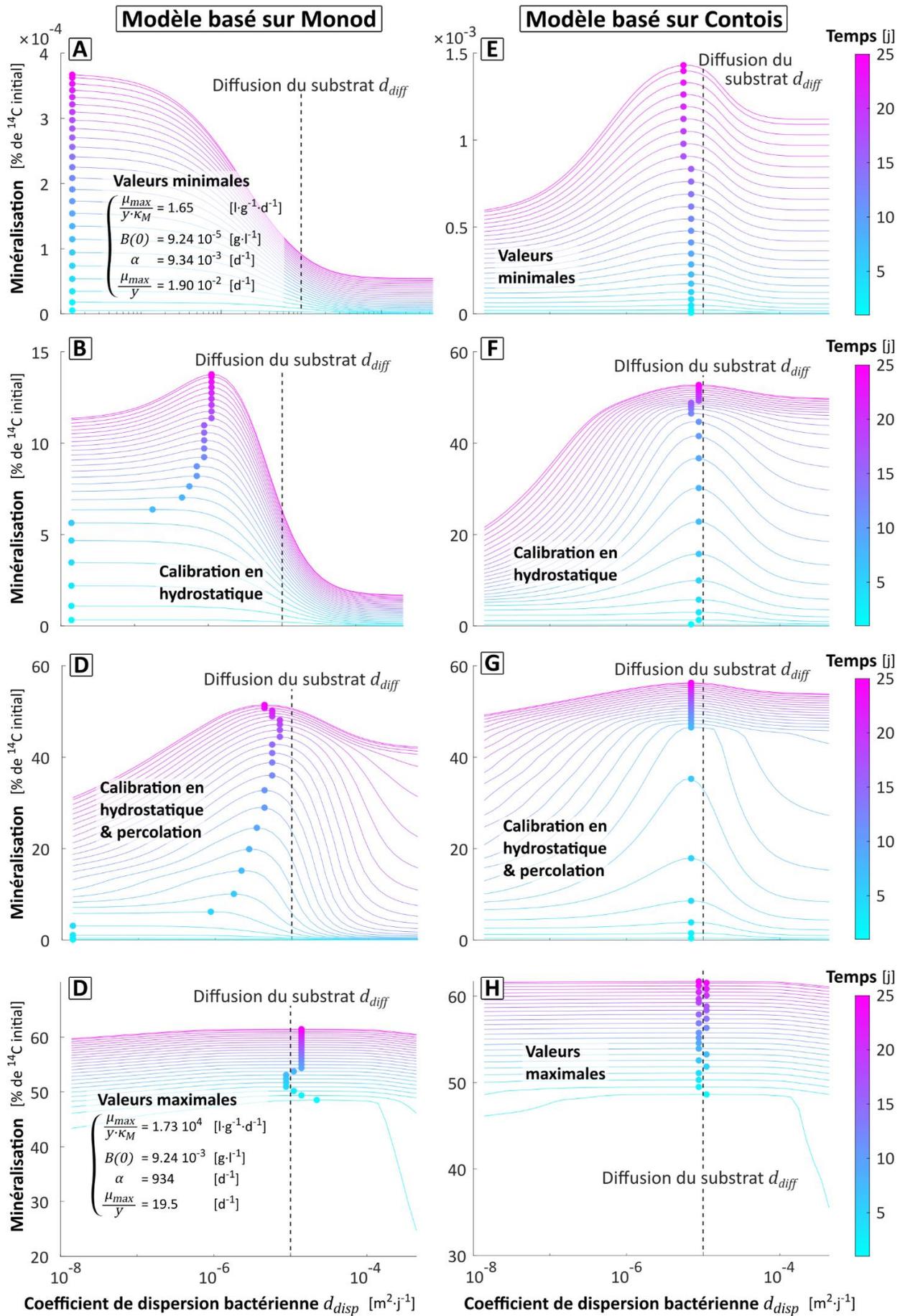


Figure IV.6. Comparaison de la dynamique temporelle de l'optimum de dispersion entre les

modèles de Monod et de Contois, dans le cas d'une dispersion continue de type diffusion. Le détail des valeurs pour les paramétrisations calibrées est donné dans la partie III.1, tableau 2.

En conclusion, la dispersion optimale des bactéries conduisant à la meilleure minéralisation est une grandeur dépendante du temps. Sous le modèle de Monod, cet optimum de dispersion augmente monotonement avec le temps, tandis que sous le modèle de Contois il reste relativement stable. Dans les deux cas, l'optimum de dispersion bactérienne finit par converger vers une valeur limite, qui semble limitée par la dispersion du substrat.

Points clés

- ▶ La dispersion optimale des bactéries conduisant à la plus haute minéralisation est une grandeur dépendante du temps.
- ▶ Cet optimum de dispersion converge. ▶ Plusieurs raisons expliquent cette convergence. La principale vient du fait que $\mu(t)$ et $B(t)$ admettent tous deux un maximum au cours du temps, ce qui signifie que l'intensité de la compétition admet elle aussi un maximum au cours du temps.
- ▶ En l'absence d'effets dus aux limites spatiales du domaine, la dispersion optimale est croissante et convergente en fonction du temps avec le modèle de Monod, tandis qu'elle est constante avec le modèle de Contois.
- ▶ La vitesse optimale des bactéries semble toujours inférieure à la vitesse de diffusion du substrat.

IV.2. Impact de la diffusion du substrat sur le rôle de la dispersion des bactéries

Les derniers résultats de la section précédente (IV.1.4) esquissent l'existence d'une relation entre la valeur du coefficient de dispersion des bactéries (d_{disp}) conduisant à la minéralisation optimale, et le coefficient de diffusion du substrat (d_{diff}). L'optimum de dégradation semble dépendre à la fois du coefficient de dispersion des bactéries mais aussi du coefficient de diffusion du substrat. Plus précisément, ces résultats suggèrent que, sous un modèle de Monod, la valeur optimale du coefficient de dispersion des bactéries est plafonnée par le coefficient de diffusion du substrat. L'approfondissement de la relation entre l'étalement des bactéries et de leur substrat est essentiel pour généraliser la prédiction de la dispersion optimale des bactéries dans un sol, en fonction des paramètres physiques du milieu tels que la diffusivité du substrat, et en fonction des traits biologiques des bactéries en particulier leur caractère oligotrophe. Une telle réflexion permettrait de comprendre comment le rôle de la dispersion bactérienne dépend de la diffusion du substrat, cette dernière pouvant être approximée par des paramètres mesurables tels que la nature chimique du substrat ou la teneur en eau du sol. L'idée reçue selon laquelle "plus le substrat diffuse rapidement, plus les bactéries ont intérêt à se disperser rapidement", est remise en cause par la complexité des interactions entre le transport et la métabolisation du substrat. Cette question a été étudiée par simulation sur les modèles précédemment calibrés.

IV.2.1. Etude en conditions de dispersion continue des bactéries : 3 régimes

Les jeux de paramètres biologiques correspondant à la calibration « hydrostatique » et à la calibration « hydrostatique & percolation » (voir section III.1.2-3.1) ont été utilisés pour simuler la minéralisation dans les conditions de l'expérience colocalisée en percolation, mais en remplaçant la dispersion hydrodynamique par une diffusion continue des bactéries sans lixiviation comme décrit dans la section précédente (IV.1.4). Le coefficient de dispersion des bactéries a été criblé sur 48 valeurs distribuées logarithmiquement de $d_{disp} = 1.4 \cdot 10^{-8}$ à $4.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$, tandis que le coefficient de diffusion du substrat a été criblé sur 9 valeurs allant de $d_{diff} = 1.0 \cdot 10^{-7}$ à $2.2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$. Pour chaque valeur de diffusivité du substrat, l'optimum de dispersion des bactéries pour un temps infini a été déterminé, comme cela a été montré précédemment (**Figure IV.6**, valeurs limites atteintes par le point rose). Pour rappel, l'optimum de dispersion est la valeur du coefficient de dispersion des bactéries qui permet d'atteindre la plus haute minéralisation au temps considéré (ici la valeur limite lorsque le temps tend vers l'infini).

La **Figure IV.7** montre que la relation entre l'optimum de dispersion des bactéries et la diffusivité du substrat obéit à une succession de trois tendances (lignes grise, orange et bleue). Comme observé précédemment (**Figure IV.6**), l'optimum de dispersion bactérienne paraît toujours inférieur à la diffusivité du substrat (ligne grise), ce qui signifie que les bactéries n'ont jamais intérêt à se disperser plus vite que leur substrat lorsque les deux sont

initialement colocalisés, que ce soit pour des bactéries copiotrophes (**Figure IV.7A**) ou oligotrophes (**Figure IV.7B**). Plus précisément, jusqu'à une certaine valeur de diffusivité du substrat (autour de $d_{diff} = 3 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$), l'optimum de dispersion des bactéries apparaît être plafonné par celle-ci. Ensuite, une deuxième tendance apparaît, où l'optimum de dispersion diminue avec l'augmentation de la diffusivité (ligne orange), avant d'atteindre une troisième phase où l'optimum de dispersion est indépendant de la diffusivité du substrat (ligne bleue).

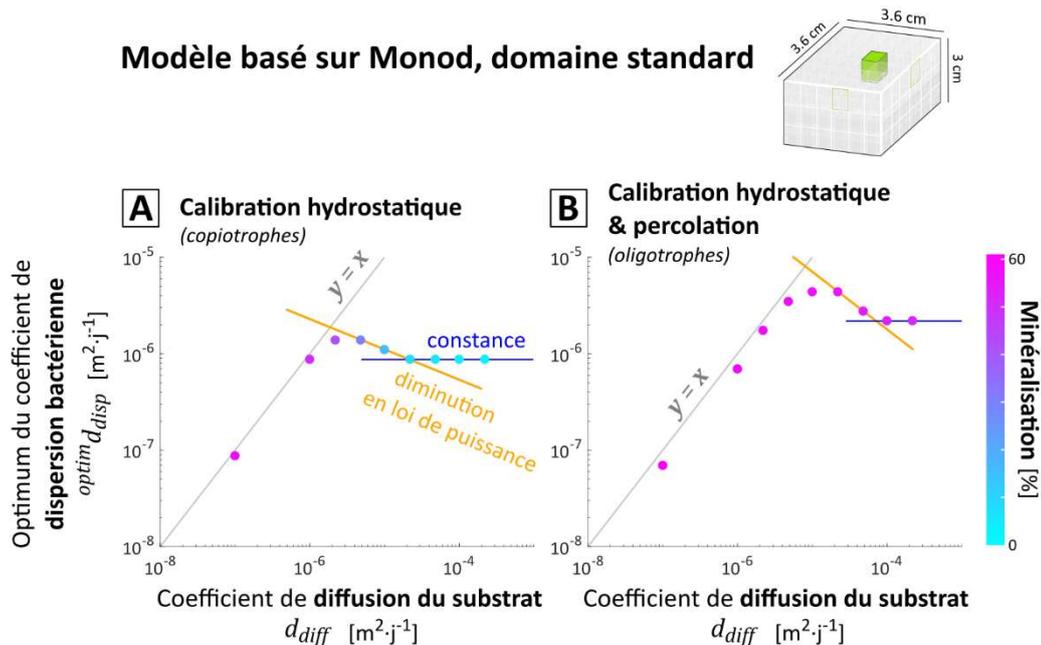


Figure IV.7. Evolution de l'optimum de dispersion des bactéries en fonction du coefficient de diffusion du substrat, dans le domaine spatial standard utilisé dans la section III.1.2, pour les jeux de paramètres biologiques calibrés en hydrostatique seulement (**A**) et en hydrostatique & percolation (**B**). La couleur des points indique l'intensité de la minéralisation optimale atteinte.

IV.2.2. Etude en domaine spatial élargi : 2 régimes

Le caractère croissant puis décroissant de la relation entre l'optimum de dispersion des bactéries et la diffusivité du substrat est confirmé lorsque le domaine spatial est élargi (**Figure IV.8**). En revanche, la tendance constante observée précédemment pour les grandes valeurs de diffusivité (ligne bleue) disparaît, ce qui montre que cette dernière était simplement due à l'exigüité du domaine spatiale. Le plafonnement de l'optimum de dispersion des bactéries par la diffusion du substrat semble être le mécanisme principal expliquant le comportement croissant de la relation (**Figure IV.8A et B**, ligne grise). En effet, l'ajustement des quatre premières valeurs de la relation par un modèle linéaire donne l'équation $y = 0.74x - 1.3 \cdot 10^{-7}$ pour la calibration « hydrostatique et percolation » (**Figure IV.8C**, ligne verte), ce qui est très proche de la droite d'identité $y = x$. L'ajustement des quatre dernières valeurs par une loi de puissance donne la relation $y = 2.6 \cdot 10^{-12} x^{-1.316}$ (**Figure IV.8C**, ligne orange). Le fondement analytique de cette relation est développé dans la partie 0.

L'optimum de dispersion des bactéries $^{optim}d_{disp}$ semble donc suivre un premier régime $^{optim}d_{disp} \approx d_{diff}$ où il est plafonné par la diffusivité du substrat, puis un deuxième régime $^{optim}d_{disp} = a/d_{diff}^b$, (avec $b > 0$) où il suit une loi de puissance inverse à la diffusivité du substrat. Ce comportement non-monotone est valable à la fois pour les bactéries copiotrophes (calibration en hydrostatique seulement, **Figure IV.8A**) et oligotrophes (calibration en hydrostatique et percolation, **Figure IV.8B**). La principale différence se situe au niveau du régime en loi de puissance inverse, qui est plus précoce et plus rapide pour les bactéries copiotrophes, bien que les données ci-dessus soient trop limitées pour en tirer une relation quantitative entre l'oligotrophie et le régime en loi de puissance inverse. En effet, l'ajustement des quatre dernières valeurs n'a pas pu être obtenu pour la calibration en hydrostatique car les optimums de dispersion bactérienne pour les grandes diffusivités sont inférieurs aux plus petites valeurs criblées (**Figure IV.8A**, valeurs à $y = 0$). Néanmoins, qualitativement, le régime en loi de puissance inverse apparaît plus tôt et est plus convexe pour les bactéries copiotrophes, ce qui implique respectivement une augmentation de b et une diminution de a lorsque l'efficacité maximale d'absorption des bactéries diminue.

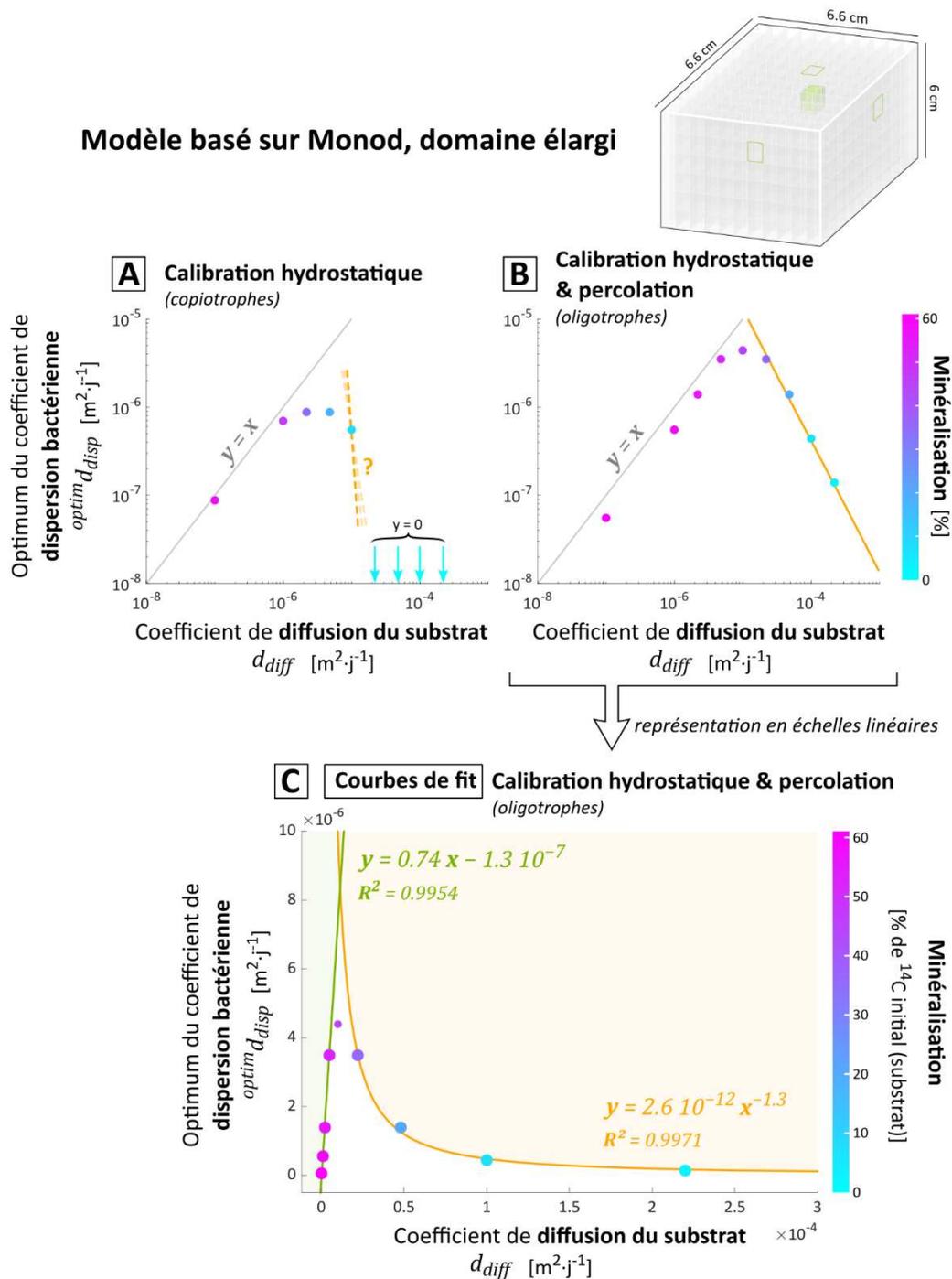


Figure IV.8. Evolution de l'optimum de dispersion en fonction du coefficient de diffusion du substrat, dans un domaine spatial élargi, pour les jeux de paramètres biologiques calibrés en hydrostatique seulement (A) et en hydrostatique & percolation (B). Moins le substrat diffuse vite, plus il est possible d'atteindre des valeurs de minéralisations élevées quand les bactéries et leur substrat sont initialement colocalisés (échelle de couleurs cyan → magenta). Les quatre premières valeurs et les quatre dernières valeurs de la calibration en hydrostatique & percolation ont été utilisées pour ajuster respectivement une loi linéaire (ligne verte) et une loi inverse (ligne orange) (C). Il faut noter qu'il n'est pas exclu que la relation $^{optim}d_{disp} = f(d_{diff})$ suive une loi inverse,

en tenant compte d'une origine autour de $x = 3 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$, étant donné que l'équation $y = 5.3 \cdot 10^{-12} / (x - 7.0 \cdot 10^{-6})$ admet un $R^2 = 0.9943$.

IV.2.3. Modulation du rôle de l'efficacité d'absorption par la diffusivité du substrat

Le régime en loi de puissance inverse semble contre-intuitif à première vue mais s'explique par le fait que, lorsque le substrat diffuse suffisamment rapidement par rapport à l'efficacité d'absorption des bactéries, ces dernières ne sont plus en mesure d'inverser le gradient de substrat. Il n'y a plus de compétition locale. Le gradient de substrat est principalement façonné par la diffusion du substrat, et prend donc la forme d'une distribution gaussienne où la concentration de substrat est toujours maximale à sa position initiale. Pour maximiser leur exposition au substrat, les bactéries ont donc intérêt à rester le plus proche possible de l'origine du substrat. C'est le contrôle de la minéralisation par la distance entre les bactéries et la source de substrat qui devient prépondérant.

Néanmoins, cela ne signifie pas que l'agrégation des bactéries suffit à assurer une minéralisation conséquente, car la fuite du substrat dans l'environnement est très importante. Les bactéries ne sont plus soumises à la compétition locale car la rétrodiffusion du substrat vers les bactéries est plus rapide que leur consommation. Néanmoins, la diffusion dans les autres directions cause dans le même temps la déperdition rapide de la majeure partie du substrat initial. En conséquence, la minéralisation optimale diminue de manière monotone avec l'augmentation de la diffusion (**Figure IV.9**), mais tandis qu'elle diminue relativement peu dans le régime « plafonné » (15-20% de la variation totale), elle est divisée par plus de 10 dans le régime « en loi de puissance inverse » pour atteindre des valeurs proches de zéro. On comprend ainsi que, lorsque la diffusivité est supérieure à $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$, les bactéries oligotrophes (**Figure IV.8B**) se retrouvent dans la même situation que celle des bactéries copiotrophes (**Figure IV.8A**) décrite dans la section III.1.2-3.1 avec une diffusivité égale à $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$: leur dispersion défavorise la dégradation et leur agrégation ne permet pas d'atteindre des minéralisations élevées.

Le passage du régime « plafonné » au régime « en loi de puissance inverse » pourrait constituer une rupture biologique importante. En régime « plafonné », les bactéries dégradent le substrat plus vite qu'il ne diffuse. Elles sont donc limitées par la compétition locale, tout en conservant la possibilité d'échapper à celle-ci grâce à leurs capacités de mobilité lorsque les conditions le permettent. Au contraire, en régime « en loi de puissance inverse », les bactéries dégradent le substrat plus lentement qu'il ne diffuse, c'est pourquoi elles ne sont pas limitées par la compétition locale, mais par leur propre vitesse de dégradation qui ne leur permet pas de surmonter les contraintes spatiales. Dans ce cas-là, l'exposition des bactéries au substrat est faible car le substrat diffuse longtemps avant qu'elles n'aient eu le temps de le dégrader, et leur dispersion potentielle ne fait que diminuer encore plus leur exposition au substrat, comme vu au paragraphe précédent. Il en découle que les bactéries n'ont aucun intérêt à se trouver dans le régime en loi de puissance inverse. La

situation où les bactéries dégradent leur substrat plus lentement qu'il ne diffuse est très préjudiciable à leur activité.

D'un autre côté, les bactéries n'ont pas forcément intérêt non plus à se trouver dans le régime « plafonné » car elles ne peuvent pas profiter pleinement de leur efficacité d'absorption. En effet dans ce régime, les bactéries sont limitées par la compétition locale. La dispersion réduit bien la compétition locale entre bactéries, mais elle les déplace également dans des zones où le substrat n'a pas encore eu le temps de diffuser. Aux très faibles diffusivités du substrat ($d_{diff} = 10^{-7} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$), les oligotrophes de la **Figure IV.9B** atteignent une minéralisation seulement 5% plus élevée que chez leurs homologues copiotrophes (**Figure IV.9A**), malgré une efficacité maximale d'absorption 10× plus élevée (III.1.2-**table 2**). Or l'évolution et le maintien d'une efficacité maximale d'absorption élevée requièrent des adaptations cellulaires coûteuses telles que l'augmentation du nombre de transporteurs membranaires ou la réduction du diamètre de la cellule (Button, 1991) et se fait donc au prix de compromis (*trade-off*) qui limitent les bactéries sur d'autres aspects comme notamment le rendement de croissance, la vitesse spécifique maximale de croissance ou le spectre de substrats utilisables (Nunan et al., 2020).

Par conséquent, la zone de transition entre les régimes « plafonné » et « en loi de puissance inverse » constitue la situation la plus favorable aux bactéries, c'est-à-dire qu'il semble y avoir un bénéfice très fort pour les bactéries à avoir une efficacité maximale d'absorption qui « concorde » avec la diffusivité du substrat.

Modèle basé sur Monod, domaine élargi

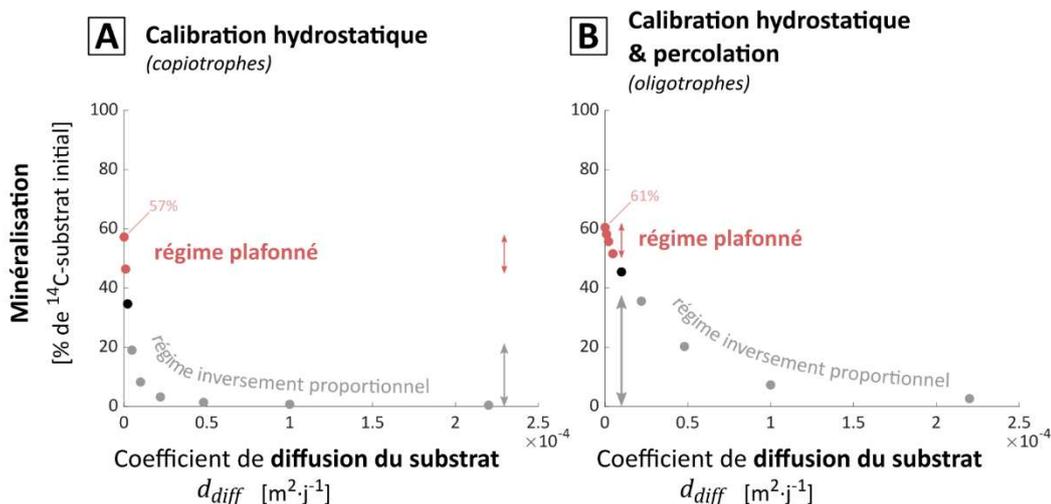


Figure IV.9. Minéralisation maximale en fonction de la diffusivité du substrat. La minéralisation maximale est la minéralisation atteinte avec l'optimum de dispersion des bactéries.

En postulant que la zone de transition entre les régimes « plafonnés » et « en loi de puissance inverse » représente la situation la plus favorable à l'activité des bactéries, il est remarquable que le coefficient de diffusion effectif calibré dans les expériences (Pinheiro et al., 2015; Babey et al., 2017) soit égal à $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$, ce qui correspond précisément aux valeurs

de transition entre le régime « plafonné » et le régime « en loi de puissance inverse » pour les bactéries oligotrophes calibrées également sur ces expériences. Cette concordance entre la valeur optimale de l'efficacité maximale d'absorption et la valeur observée dans les expériences nécessite d'être examinée sur d'autres données, mais si elle venait à être étayée, cela suggérerait l'existence d'une relation entre l'efficacité maximale d'absorption des bactéries et la diffusivité de leur substrat.

Une telle relation pourrait s'expliquer par deux mécanismes. Le premier mécanisme serait une adaptation biologique du métabolisme des bactéries à leur milieu. En effet, un substrat peu diffusif contraint les bactéries à rester agrégées autour de l'origine du substrat. La forte concentration en substrat qui en découle rend inutile la présence, chez ces bactéries, d'une efficacité maximale d'absorption élevée, qui devient de fait un désavantage sélectif majeur en raison de son coût cellulaire décrit quelques lignes plus haut. Le deuxième mécanisme explicatif serait une relation physique directe entre l'efficacité maximale d'absorption et le coefficient de diffusion. En effet, la signification de l'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$, ou même simplement de la constante de saturation κ_M , n'a pas encore été clairement établi (Lobry et al., 1992; Liu, 2007), mais certaines études ont observé la dépendance entre κ_M et les contraintes de diffusion du substrat (Focht and Shelton, 1987; Arnaldos et al., 2015). L'étude de Button et al. (2004) prédit théoriquement une proportionnalité entre l'efficacité maximale d'absorption et le coefficient de diffusion. La récente étude de Ugalde-Salas et al. (2020) propose, dans une reformulation thermodynamique du modèle de Monod, que y/κ_M traduise un volume spécifique de récolte (volume auquel les bactéries ont accès pour absorber leur substrat entre deux divisions cellulaires), et pose la question de la dépendance de ce volume aux paramètres du milieu.

L'existence d'un optimum unique de l'ensemble $\{(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M, d_{disp}, d_{diff}\}$ est une hypothèse méritant une étude approfondie au vu des implications écologiques importantes qui en découleraient. En dehors du sol nu (*bulk soil*), dans des zones riches du sol telles que la rhizosphère, il est possible que les communautés bactériennes s'assemblent sous forme de biofilms de quelques dizaines de μm d'épaisseur (Or et al., 2007), bien que l'existence de biofilms de cette envergure soient remise en cause (Baveye, 2020) en faveur de « micro-biofilms », de « (micro-)colonies » ou simplement « d'agglomérats microbiens ». Au sein de ces agglomérats, les densités sont beaucoup plus importantes que celles vues précédemment, pouvant atteindre 5 cellules par μm^3 dans les biofilms artificiels étudiés par Holden et al. (1997b), à comparer aux densités limitantes de 10^{-5} cellules par μm^3 dans les films d'eau du **Tableau 4** (section III.2.2). Dans ces biofilms, la diffusivité du substrat est freinée du fait de la composition du biofilm et de la densité bactérienne (Beuling, 2000) et peut ainsi être de plusieurs ordres de grandeur plus faible que dans l'eau (par exemple $d_{diff} = 1.12 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$ dans Holden et al. (1997b)). D'autres mécanismes écologiques (interactions entre bactéries, interactions avec le sol) différencient le fonctionnement des biofilms et des bactéries planctoniques (Lerch et al., 2017). Néanmoins, au regard des densités beaucoup plus élevées et des diffusivités beaucoup plus faibles observées dans les

biofilms, la relation conjecturée entre l'efficacité maximale d'absorption des bactéries, leur coefficient optimal de dispersion et le coefficient de diffusion du substrat va dans le sens de l'hypothèse émise à la section III.1.2-4.3 selon laquelle les bactéries copiotrophes seraient de préférence immobiles dans des (micro)agglomérats bactériens en contact avec les sources de substrat, en ajoutant désormais que leur physiologie copiotrophique et leur agrégation seraient optimales par rapport aux faibles diffusivités observées dans ces agglomérats.

Points clés

- ▶ La relation établie précédemment entre l'efficacité maximale d'absorption des bactéries et leur vitesse de dispersion optimale dépend de la vitesse de diffusion du substrat
- ▶ L'activité individuelle des bactéries et la minéralisation globale qui en résulte sont diminuées dès lors qu'il y a divergence entre la vitesse de diffusion du substrat et la vitesse de dispersion des bactéries.
- ▶ Les bactéries n'ont pas intérêt à se disperser plus vite que leur substrat. ▶ Elles n'ont pas intérêt non plus à être en présence d'un substrat qui diffuse trop vite par rapport à leur vitesse d'absorption
- ▶ Les plus hautes valeurs de minéralisation globale sont atteintes lorsque la diffusion du substrat est faible par rapport à la vitesse d'absorption des bactéries, et que les bactéries se dispersent à la même vitesse que leur substrat. ▶ Cette situation correspond vraisemblablement à une compétition locale intense.
- ▶ Il est plausible qu'il existe une valeur optimale d'efficacité maximale d'absorption, c'est-à-dire une certaine valeur qui permette d'atténuer la compétition locale ainsi que les coûts cellulaires associés, tout en restant suffisamment grande par rapport à la vitesse de diffusion de substrat.

IV.3. Formalisation analytique de la compétition

La contribution principale de cette thèse (section III.1.2) constitue l'une des premières mises en évidence du rôle majeur de la compétition locale pour le substrat au sein d'une même population bactérienne vis-à-vis de la dynamique du carbone des sols nus (voir section III.2.1). Cette compétition locale, se traduisant par une régulation de la dégradation par la densité bactérienne, est étonnante de premier abord au vu des faibles densités bactériennes observées dans les sols mais s'explique par les fortes efficacités maximales d'absorption d'une partie des bactéries du sol, qualifiées d'oligotrophes et adaptées à des environnements très pauvres, comme vu dans la section III.1.2-4.1.1. L'impact de l'efficacité maximale d'absorption sur cette régulation de la dégradation par la densité a été formalisé sous forme d'une relation entre l'efficacité maximale d'absorption et la dispersion optimale des bactéries (voir section III.1.2). Il apparaît qu'une telle relation n'a été suggérée que dans quelques très rares études, comme l'étude de Pagel et al. (2020), et à ma connaissance jamais exprimée de manière quantitative auparavant. L'étude de Pagel et al. (2020), sur le contrôle spatial de la dégradation du carbone par les communautés microbiennes, montre par modélisation que la répartition spatiale simulée des bactéries oligotrophes tend à devenir plus uniforme et dispersée que celle des copiotrophes.

La section IV.2 montre en outre que l'intensité de la régulation de la dégradation par la densité bactérienne ne dépend pas de la valeur absolue de l'efficacité maximale d'absorption, mais de son rapport avec la diffusivité du substrat. Les milieux très peu diffusifs peuvent engendrer une forte compétition locale même entre des bactéries peu compétitives. Une telle relation entre dispersion optimale des bactéries, efficacité maximale d'absorption et diffusivité du substrat ne semble pas avoir été formulée auparavant.

Afin de palier à l'absence de relations établies dans la littérature auxquelles confronter les relations établies numériquement dans les sections précédentes, cette section se propose de redévelopper une relation permettant d'exprimer la dispersion optimale d_{disp} des bactéries en fonction des autres paramètres, en particulier l'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$ et le coefficient d_{diff} de diffusion du substrat, par une méthode cette fois analytique. L'obtention d'une telle métrique devrait également fournir un éclairage supplémentaire sur les mécanismes en jeu et les valeurs des coefficients.

La coïncidence entre la dispersion bactérienne observée dans les expériences (valeur calibrée) et l'optimum de dispersion maximisant la minéralisation (III.1.2-fig. 4) laisse à penser que la dispersion des bactéries n'est pas complètement passive et que les bactéries se dispersent seulement tant que cela leur permet d'échapper à la compétition locale.

IV.3.1. Difficultés à l'étude analytique

L'idéal serait de pouvoir proposer une métrique exprimant la dispersion optimale des bactéries en fonction de tous les autres paramètres physique (diffusivité du substrat, masses initiales etc.) et biologique (efficacité maximale d'absorption etc.). Malheureusement,

l'élaboration d'une telle métrique se heurte à plusieurs difficultés. L'une d'entre elle est l'importance des interactions entre les processus. En effet, les flux de diffusion ou dispersion façonnent les gradients de substrat ou de bactéries, qui à leur tour contrôlent les flux de diffusion ou dispersion. La dégradation bactérienne modifie les masses de substrat et de bactéries en présence, qui à leur tour modifient les vitesses de dégradation. Ce couplage des processus rend difficile la résolution analytique d'équations (voir aussi section II.3.1). Les équations des flux de diffusion, dispersion et dégradation qui illustrent ce couplage, présentées de manière détaillée dans la section III.1.2, sont reprises ici sous une forme simplifiée (sans tenir compte des processus de sorption, de recyclage des nutriments et d'accommodation bactérienne) :

$$\text{Flux diffusif de substrat} \quad d_{diff} \frac{\partial^2 S(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{Éq 26}$$

$$\text{Flux dispersif de bactéries} \quad d_{disp} \frac{\partial^2 B(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{Éq 27}$$

$$\text{Dynamique de population bactérienne} \quad \frac{\partial B}{\partial t} = (\mu - m_t) B \quad \text{Éq 28}$$

$$\text{Flux de consommation du substrat} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\mu}{y} B \quad \text{Éq 29}$$

$$\text{Vitesse spécifique de croissance bactérienne} \quad \mu = \mu_{max} \frac{S}{\kappa_M + S} \quad \text{Éq 30}$$

avec S et B les concentrations respectives en substrat et bactéries exprimées en masse de carbone par unité de volume, x la position spatiale, d_{diff} et d_{disp} les coefficients respectifs de diffusion du substrat et de dispersion des bactéries, μ la vitesse spécifique de croissance des bactéries, m_t le taux de mortalité des bactéries, y le rendement de conversion du substrat en biomasse, μ_{max} la vitesse spécifique maximale de croissance et κ_M la constante de saturation de Monod.

Une deuxième difficulté réside dans la nécessité de considérer des systèmes dynamiques, car l'équilibre de la dilution du substrat et de la densité bactérienne dans la régulation de la minéralisation est fondamentalement un équilibre dynamique. En effet, les systèmes stationnaires rendent difficilement compte de l'impact de la dispersion des bactéries. Ce point est illustré dans l'exemple de la **Figure IV.10** qui représente les profils spatiaux de concentration en substrat et de densité de population bactérienne dans un système linéaire (1D) à un état stationnaire, avec des processus bioréactifs simplifiés. La vitesse de dégradation du substrat par les bactéries dS/dt est proportionnelle à la concentration en substrat S (cinétique de 1^{er} ordre, Éq 31) et la densité de population bactérienne B est invariante. Le système est symétrique en $x = 0$, x représentant la distance à l'origine. La concentration en substrat est imposée par $S = S_U$ aux limites du domaine spatial $|x| = L$. La solution analytique est décrite par les équations ci-dessous :

$\mu = \frac{\mu_{max}}{\kappa_M} S$	Pour $ x \in [0 L]$	Éq 31
$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{y} B + \nabla(d_{diff} \nabla S)$	Pour $ x \in [0 L]$	Éq 32
$S = S_U \left(1 - ae^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2} \right)$	Pour $ x \in [0 \lambda]$	Éq 33a
$S = S_U \left(1 + ae^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\lambda} - 2\right)^2} \right)$	Pour $ x \in [\lambda L]$	Éq 33b
$B = \frac{d_{diff}}{\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M}} \frac{\gamma^2 - x^2}{\gamma^4} \left(\frac{S_U}{S} - 1 \right)$	Pour $ x \in [0 \lambda]$	Éq 34a
$B = 0$	Pour $ x \in [\lambda L]$	Éq 34ab

Le système se trouve à un état d'équilibre où le flux « rétro-diffusif » du substrat en direction de la zone la plus appauvrie en substrat ($x = 0$), entraîné par le gradient de substrat, contrebalance exactement le flux de substrat consommé par les bactéries, concentrées autour de $x = 0$ (Éq 32). Il est à noter que, pour des raisons de généralisation, le profil de substrat est défini ici pour $|x| < L$, avec L une distance quelconque (Éq 33a et b), mais la dégradation bactérienne n'intervient que pour $|x| < \lambda$ (Éq 33a et Éq 34a). Le gradient de substrat entre les positions λ et L est linéaire (Éq 12b) et s'établit par simple diffusion entre deux points de concentrations fixes, en l'absence de dégradation bactérienne (Éq 13b) et autre processus biochimique (Crank, 1975).

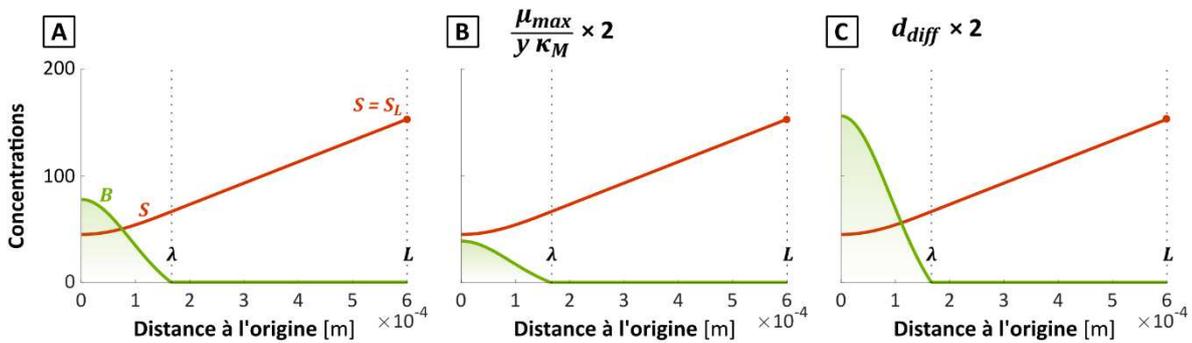


Figure IV.10. Profils spatiaux de concentrations en substrat et bactéries dans trois états stationnaires différents. Les concentrations en substrat sont indiquées en rouge et les densités bactériennes en vert. Les trois états sont différenciés par les valeurs du coefficient de diffusion du substrat d_{diff} et de l'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max} / \kappa_M$. La limite spatiale du domaine est donnée par la distance $L = 600 \mu\text{m}$. La distance λ caractérise la forme du profil spatial de substrat comme défini plus en détails dans la **Figure IV.11**. L'unité des concentrations

en substrat et en bactéries correspond à celle définie dans la **Figure IV.11**. Seule la concentration en substrat en $x = L$ est imposée.

D'une part, l'Éq 34a et la comparaison des **Figure IV.10B** et **C** avec la **A** montrent que, dans ce système, l'augmentation du coefficient de dispersion du substrat ou de l'efficacité maximale d'absorption n'entraîne pas d'étalement de la population bactérienne au-delà de $x = \lambda$, à partir du moment où le profil spatial de substrat en régime permanent reste identique. L'adaptation de la dispersion des bactéries, mise en évidence dans la section IV.2, n'est donc pas visible ici. Néanmoins, on peut également décrire le niveau d'agrégation des bactéries en termes de densités plutôt qu'en termes de distance d'étalement. Or la masse totale de bactéries augmente avec le coefficient de dispersion du substrat et diminue avec l'efficacité maximale d'absorption (Éq 34a). Ainsi dans un régime permanent, les bactéries doivent être plus denses lorsque la diffusion est plus rapide.

D'autre part, bien que la diffusion et la dégradation sont à l'équilibre, les bactéries sont localisées là où les concentrations en substrat sont les plus basses. Cela signifie que la présence d'un état stationnaire n'implique pas que la dispersion des bactéries soit optimale.

IV.3.1.1. Démonstration de la solution analytique

On s'intéresse ici à un système unidimensionnel défini de x allant de $-\infty$ à $+\infty$, x étant la distance à l'origine. Dans un premier temps, on choisit un profil initial de substrat ($t = 0$). Un profil spatial particulièrement classique est celui de la distribution normale obtenue après diffusion d'un Dirac¹ initial de substrat. Ce profil est symétrique en $x = 0$. Pour cette démonstration, on définit à titre d'exemple un profil de substrat de forme similaire à la distribution normale classique tel qu'illustré dans la **Figure IV.11B** et dans l'Éq 35 :

$$S = S_U - \frac{m_S}{\sqrt{2\pi} \lambda A} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2} \quad \text{Pour } x \in [-\infty + \infty] \quad \text{Éq 35}$$

La largeur de la zone appauvrie en substrat est caractérisée par la distance λ . Ce profil de substrat apparaît typiquement après un certain temps de diffusion $t' = \tau_\lambda = \lambda^2 / 2d_{diff}$ à partir d'un profil uniforme de substrat prenant la valeur S_U à laquelle est soustraite au temps $t' = 0$ une masse m_S de substrat suivant une distribution de Dirac (**Figure IV.11A**). La concentration en substrat est considérée fixée à S_U en $x = -\infty$ et $x = +\infty$. A partir de l'expression de $S(x)$ (Éq 35), il est possible de définir la variation temporelle du profil de concentration en substrat due à la diffusion, à l'instant $t = 0$:

$$\frac{dS}{dt}(x) = (S_U - S(x)) d_{diff} \frac{\lambda^2 - x^2}{\lambda^4} \quad \text{Pour } x \in [-\infty + \infty] \quad \text{Éq 36}$$

¹ La distribution de Dirac correspond ici à une concentration en substrat prenant une valeur infinie à l'origine ($x=0$) et une valeur nulle partout ailleurs.

Cette relation s'obtient en exprimant λ en fonction du temps comme dans le paragraphe précédent, c'est-à-dire :

$$\lambda = \sqrt{2 d_{diff} t'} \quad \text{Pour } t' = \tau_\lambda \quad \text{Éq 37}$$

Pour obtenir un état stationnaire, il faut que cette variation soit compensée par la dégradation bactérienne du substrat :

$$\frac{dS}{dt}(x) = -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} S(x) B(x) \quad \text{Pour } x \in [-\infty + \infty] \quad \text{Éq 38}$$

Cela implique l'expression suivante pour le profil de densités bactériennes, donnée par l'Éq 34a :

$$B(x) = \frac{d_{diff}}{\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M}} \frac{\gamma^2 - x^2}{\gamma^4} \left(\frac{S_U}{S(x)} - 1 \right) \quad \text{Pour } x \in [-\infty + \infty] \quad \text{Éq 13a}$$

La densité bactérienne étant toujours positive, cette solution est considérée sur l'intervalle où elle est positive, c'est-à-dire pour $-\lambda < x < \lambda$ (**Figure IV.11C**, courbes non-transparentes). Afin de généraliser la solution à un système linéaire de longueur L , le profil de substrat à l'équilibre est extrapolé linéairement sans qu'il soit nécessaire de le contrebalancer par la dégradation bactérienne (**Figure IV.11D**). (Pour plus de détails sur les gradients de substrat entre deux points en régime permanent, voir la section IV.4.4.)

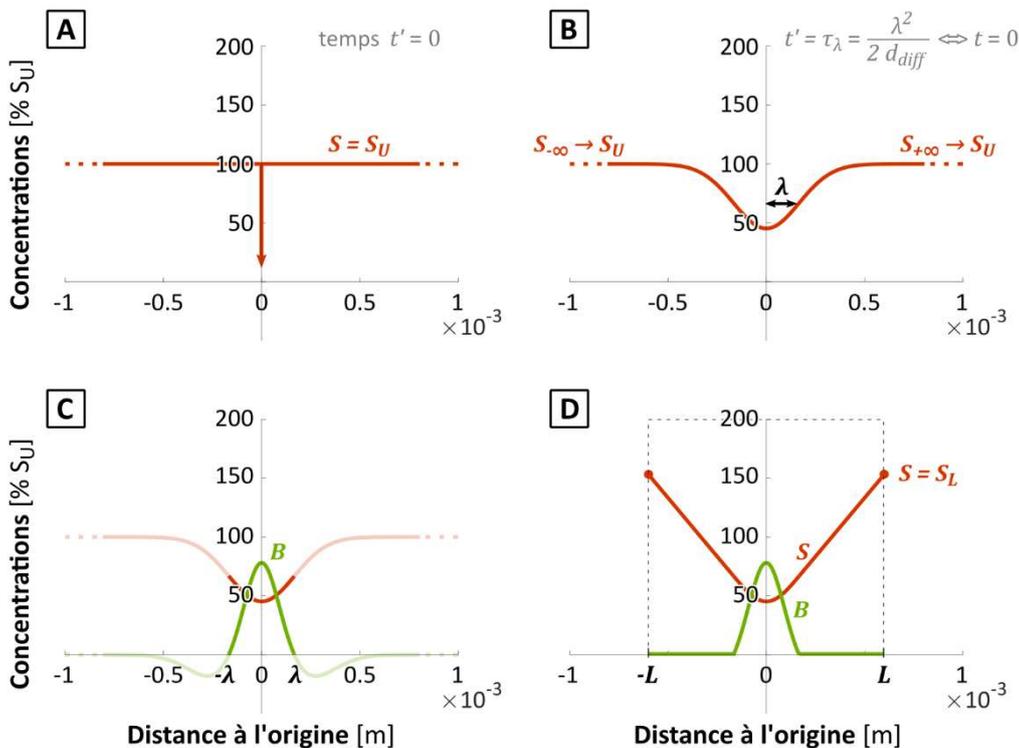


Figure IV.11. Définition du profil initial de substrat utilisé dans la démonstration. Dans cet exemple, la masse initiale de substrat enlevée m_s est choisie égale à $1.9269 \mu\text{g}$ (masse de

carbone), et la section A égale à 10^{-4} m^2 . Le coefficient de diffusion est égal à $0.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{j}^{-1}$, d'après la valeur calibrée par Babey et al. (2017) avec un maillage spatial fin.

IV.3.2. Maximisation de l'exposition des bactéries au substrat lorsque la diffusion est négligeable en absolu

On considère, à un temps initial $t' = \tau_\lambda$, équivalent à $t = 0$, un profil de substrat suivant une distribution normale, dont l'étalement moyen quadratique est connu et désigné par la distance λ (Éq 39). Comme auparavant, x désigne la distance à l'origine, et le système est symétrique en $x = 0$.

$$S(t = 0, x) = \frac{m_S(t = 0)}{\sqrt{2\pi} \lambda A} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2} \quad \text{Éq 39}$$

Une telle distribution s'établit après un temps τ_λ de diffusion à partir d'un apport initial de substrat distribué selon une loi de Dirac :

$$\lambda = (2 d_{diff} \tau_\lambda)^{\frac{1}{2}} \quad \text{Éq 40}$$

On considère une masse de bactéries m_B fixée. La problématique est de déterminer la répartition des densités bactériennes de manière à ce que, après un temps δt de diffusion et de dégradation, les bactéries soient toutes exposées à la concentration maximale en substrat. Pour remplir une telle condition, cela implique que le profil spatial de substrat soit maximal et uniforme en tout point où des bactéries sont présentes. Cela correspond à un profil de substrat « aplani » comme sur les courbes violettes de la **Figure IV.12**. Cette répartition peut alors être considérée comme optimale, du moins à l'instant considéré. Pour simplifier la résolution du problème, on considère un intervalle de temps δt suffisamment court pour que l'impact de la diffusion sur le profil de substrat soit négligeable en absolu, comme illustré sur la **Figure IV.12D**.

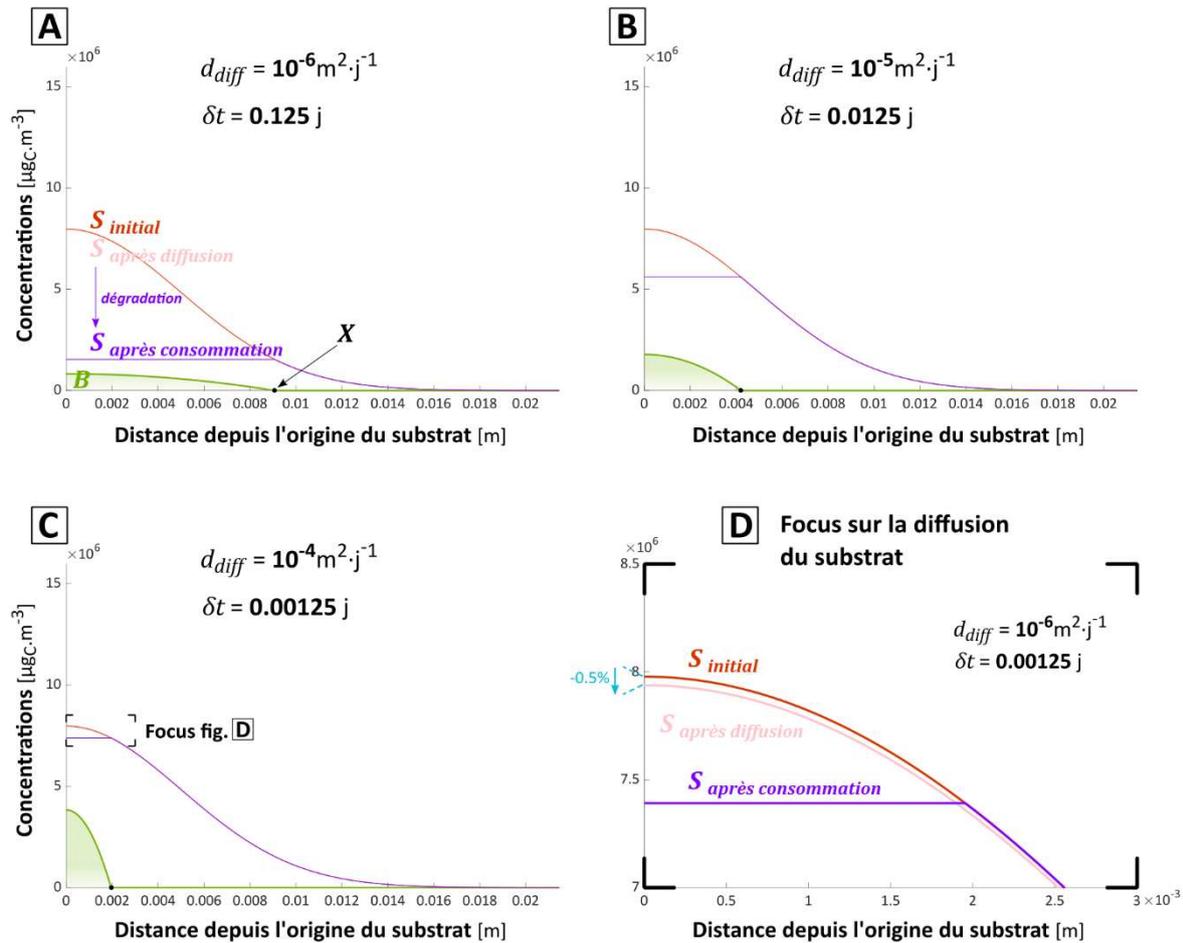


Figure IV.12. Profils de bactéries nécessaires pour aplanir le profil de substrat en fonction du coefficient de diffusion (A, B, C). Modèle basé sur Monod. Le domaine spatial correspond à un système linéaire (1D) infini. La section *A* est choisie égale à 10^{-5} m^2 . L'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$ est égal à sa valeur calibrée sur les expériences hydrostatiques et en percolation (III.1.2-table 2 : $26.5 \text{ g} \cdot \mu\text{g}^{-1} \cdot \text{j}^{-1}$). Le profil initial de substrat (courbe rouge) correspond à une distribution normale de moyenne quadratique d'étalement $\lambda = 5 \text{ mm}$. Le profil de substrat après dégradation bactérienne seule est indiqué en violet. Le temps δt de dégradation est choisi de manière à ce que le profil de substrat après diffusion seule (indiqué en rose pâle) puisse être considéré comme confondu avec le profil initial (effet négligeable de la diffusion, D). Le profil de bactéries est indiqué en vert. Il n'est pas tenu compte de la dynamique de population des bactéries, de sorte que la masse de bactéries soit constante et égale à $1/10^6$ de la masse initiale de substrat, elle-même égale à $1 \mu\text{g}$ de carbone.

Dans un premier temps, on considère qu'une variation du profil de substrat négligeable en absolu correspond à un rapport $(S(t=0) - S(t=\delta t))/S(t=0)$ proche de 0. Ce rapport dépend du coefficient de dispersion du substrat d_{diff} et de l'étalement initial du substrat λ . En s'intéressant uniquement à la position $x = 0$, on peut exprimer une variation infinitésimale ε de ce rapport de la manière suivante :

$$\varepsilon = 1 - \frac{S(t = \delta t, x = 0)}{S(t = 0, x = 0)} \quad \text{Éq 41}$$

D'après l'expression de S (Éq 39), cette expression est équivalente à :

$$\varepsilon = 1 - \sqrt{\frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 2 d_{diff} \delta t}} \quad \text{Éq 42}$$

L'intervalle de temps δt peut alors s'exprimer :

$$\delta t = \frac{\lambda^2}{2 d_{diff}} \left(\frac{1}{(1 - \varepsilon)^2} - 1 \right) \quad \text{Éq 43}$$

Pour les valeurs de ε choisies suffisamment petites, on peut considérer que la diffusion peut être négligée sur l'intervalle de temps δt . On considère par ailleurs que la variation de la population bactérienne peut également être négligée sur cet intervalle de temps δt . La problématique se résume alors à trouver, pour une biomasse m_B fixée et invariante, la distribution bactérienne $B(x)$ qui engendre une dégradation pendant δt permettant d'aplanir le profil de substrat, ou en d'autres termes d'annuler le gradient spatial de substrat, au moins partiellement. L'étendue de la zone sur laquelle le gradient spatial de substrat devient nul dépend des valeurs de paramètres. On appelle X la limite de cette zone telle que le gradient spatial de substrat après un temps δt de dégradation est nul pour tout $|x| < X$, X pouvant prendre toute valeur de 0 à l'infini. Pour simplifier suffisamment la détermination de la solution analytique, on considère une vitesse de dégradation bactérienne μ proportionnelle à la concentration en substrat :

$$\mu = \frac{\mu_{max}}{\kappa_M} S \quad \text{Éq 31}$$

La dégradation du substrat par les bactéries s'écrit :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\mu}{y} B = -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} S B \quad \text{Éq 44}$$

Cette expression équivaut à :

$$\frac{\partial S}{S} = -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} B \partial t \quad \text{Éq 45}$$

L'intégration de cette expression sur l'intervalle de temps δt permet d'obtenir l'Éq 47 :

$$\int_{t=0}^{\delta t} \frac{\partial S}{S} = \int_{t=0}^{\delta t} -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} B \partial t \quad \text{Éq 46}$$

$$\ln \left(\frac{S(t = \delta t)}{S(t = 0)} \right) = -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} B \delta t \quad \text{Éq 47}$$

Pour faire apparaître le gradient spatial de substrat, l'expression précédente est dérivée selon x :

$$\frac{\partial S(t = \delta t)}{S(t = \delta t) \partial x} - \frac{\partial S(t = 0)}{S(t = 0) \partial x} = -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \frac{\partial B}{\partial x} \delta t \quad \text{Éq 48}$$

D'après la condition de nullité du gradient spatial de S pour $|x| < X$ au temps $t = \delta t$, l'équation précédente peut être intégrée sur x allant de 0 à X et être simplifiée sous la forme de l'Éq 49:

$$\int_{x=0}^X \frac{\partial S(t = \delta t)}{S(t = \delta t)} - \int_{x=0}^X \frac{\partial S(t = 0)}{S(t = 0)} = \int_{x=0}^X -\frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \partial B \delta t \quad \text{Éq 49}$$

$$\ln \left(\frac{S(t = 0, x)}{S(t = 0, 0)} \right) = \frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} (B(x) - B(0)) \delta t \quad \text{Éq 50}$$

D'après l'expression de $S(t=0)$ donnée par l'Éq 40, l'expression précédente peut être réécrite :

$$B(x) = B(0) - \frac{x^2}{2 \frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \delta t \lambda^2} \quad \text{Pour } |x| \in [0 X] \quad \text{Éq 51}$$

Comme la densité bactérienne $B(x)$ ne peut être que positive ou nulle, cela implique que :

$$B(0) = \frac{X^2}{2 \frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \delta t \lambda^2} \quad \text{Pour } |x| \in [0 X] \quad \text{Éq 52}$$

conduisant ainsi à l'expression :

$$B(x) = \frac{X^2 - x^2}{2 \frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \delta t \lambda^2} \quad \text{Pour } |x| \in [0 X] \quad \text{Éq 53}$$

Ainsi, une population de bactéries répartie selon la distribution donnée par l'Éq 53 permet, au cours d'un temps δt de dégradation, d'aplanir le profil spatial de substrat sur une distance X à partir de l'origine. Cette étendue X est contrainte par la taille de la population bactérienne, fixée à m_B . La densité bactérienne doit respecter la condition :

$$\int_{-X}^X B(x) A \partial x = m_B \quad \text{Éq 54}$$

Cette relation conduit à l'expression suivante de X :

$$X = \left(\frac{3}{2} \frac{m_B}{A} \frac{\mu_{max}}{y \kappa_M} \delta t \lambda^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Éq 55}$$

Ainsi, en exprimant δt selon l'Éq 43, l'étendue de l'étalement des bactéries permettant d'annuler le plus possible le gradient de substrat sur un temps δt est donnée par la formule suivante :

$$X = \left(\frac{3}{4} \frac{m_B}{A} \frac{\frac{\mu_{max}}{yK_M}}{d_{diff}} \left(\frac{1}{(1-\varepsilon)^2} - 1 \right) \lambda^4 \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Éq 56}$$

Il est à noter que la masse totale initiale de substrat n'intervient pas dans cette formule. D'autre part, bien que la dynamique populationnelle des bactéries ne soit pas considérée ici, on peut d'ores et déjà faire l'hypothèse que la convergence temporelle de X , en d'autres termes la convergence temporelle de l'étalement optimal des bactéries (voir section IV.1), dépend de la convergence de m_B .

Avec les valeurs de m_B , A , $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$ et λ choisies en accord avec la section IV.2.2 telles que précisées en légende de la **Figure IV.12**, et une valeur d' ε choisie égale à 0.5%, on obtient la relation suivante :

$$X = \left(7.46 \cdot 10^{-11} \frac{1}{d_{diff}} \left(\frac{1}{(1-\varepsilon)^2} - 1 \right) \right)^{0.333} = 9.09 \cdot 10^{-5} \left(\frac{1}{d_{diff}} \right)^{0.333} \quad \text{Éq 57}$$

Comme représenté sur la **Figure IV.12**, X caractérise l'étalement des bactéries, optimal au sens où il permet à un instant donné aux bactéries d'être toutes exposées à la concentration maximale en substrat. Par ailleurs, la relation entre la dispersion optimale des bactéries et le coefficient de diffusion du substrat déterminée numériquement dans la section IV.2.2 est :

$$d_{disp (optim)} = 2.6 \cdot 10^{-12} \left(\frac{1}{d_{diff}} \right)^{1.316} \quad \text{Éq 58}$$

L'étalement moyen quadratique σ_{optim} des bactéries, c'est-à-dire la moyenne quadratique de la distance parcourue par les bactéries lors de leur dispersion sur un temps Δt s'exprime alors comme :

$$\sigma_{optim} = \sqrt{6 d_{disp} \Delta t} = 3.9 \cdot 10^{-6} \left(\frac{1}{d_{diff}} \right)^{0.658} \sqrt{\Delta t} \quad \text{Éq 59}$$

L'expression analytique de l'Éq 57 se rapproche de cette formule. On peut faire l'hypothèse que la prise en compte de la dynamique de population bactérienne, qu'on peut décrire comme un phénomène auto-catalytique, pourrait conduire à doubler la puissance du terme

$1/d_{diff}$ dans l'Éq 57. Par ailleurs, la concavité de la relation de Monod $\mu = f(S)$ induit que l'activité des bactéries n'augmente pas linéairement avec la concentration en substrat. Ainsi, la prise en compte de la relation de Monod pour décrire l'activité des bactéries, à la place de la relation proportionnelle utilisée ici, conduirait à une atténuation (modérée) de l'activité des bactéries proches de $x = 0$. On s'attend à ce que cela réduise l'étendue X de l'étalement des bactéries, du fait de la nécessité d'avoir plus de bactéries proches de $x = 0$, réduisant vraisemblablement le facteur $9.09 \cdot 10^{-5}$.

IV.3.3. Maximisation de l'exposition des bactéries au substrat lorsque la diffusion est négligeable relativement à la dégradation

Le fait de considérer qu'il existe un intervalle de temps δt suffisamment petit pour que la diffusion du substrat ait un effet négligeable *absolu* est une simplification importante. Plus rigoureusement, pour pouvoir négliger l'effet de la diffusion pendant une période de dégradation, il faut déterminer un intervalle δt sur lequel la diffusion est négligeable *relativement* à la dégradation. Lorsque la dégradation est faible comme c'est le cas sur les temps très courts (**Figure IV.12C**), la diffusion doit être encore plus faible.

Pour cela, l'Éq 55 a été reprise en remplaçant l'expression de δt définie aux Éq 41-Éq 43 par une expression dépendant de l'écart relatif entre la diffusion et la dégradation. Afin de respecter la condition d'annulation du gradient de substrat, la concentration en substrat à l'origine après un temps de dégradation doit être égale à la concentration en substrat en tout point où des bactéries sont présentes, prenant ainsi la valeur $S(t=0, x=X)$. La variation du profil de substrat est négligeable comparativement à la variation du profil de substrat par dégradation lorsque la grandeur ε suivante tend vers 0 :

$$\varepsilon = \frac{S(t=0) - S(t=\delta t)}{S(t=0) - S(t=0, x=X)} \quad \text{Pour } |x| \in [0, X] \quad \text{Éq 60}$$

La dégradation n'est pas encore considérée dans cette expression. L'intervalle δt représente l'intervalle de temps pendant lequel la diffusion est considérée.

En s'intéressant à la concentration en substrat à l'origine $x = 0$, on peut alors écrire :

$$\varepsilon = \frac{1 - \sqrt{\frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 2 d_{diff} \delta t}}}{1 - e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X}{\lambda}\right)^2}} \quad \text{Éq 61}$$

$$\delta t = \frac{\lambda^2}{2 d_{diff}} \left(\frac{1}{\left(\varepsilon \left(e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X}{\lambda}\right)^2} - 1 \right) + 1 \right)^2} - 1 \right) \quad \text{Éq 62}$$

En utilisant cette expression dans l'Éq 55, on obtient l'expression suivante de X :

$$X = \left(\frac{3}{2} \frac{m_B}{A} \frac{\mu_{max}}{y\kappa_M} \frac{\lambda^4}{2 d_{diff}} \left(\frac{1}{\left(\varepsilon \left(e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X}{\lambda} \right)^2} - 1 \right) + 1 \right)^2} - 1 \right) \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Éq 63}$$

La solution X de cette équation a été déterminée numériquement

Sur la **Figure IV.13**, la droite verte ($x = y$) représente le terme de gauche de l'Éq 63, tandis que le terme de droite est représenté par les courbes rouges pour différentes valeurs du coefficient de diffusion du substrat d_{diff} . On peut remarquer que les courbes rouges (terme de droite) suivent deux régimes, le premier pouvant être approximé par une équation de type $y = ax^b$, le deuxième par une équation de type $y = c$, avec une transition autour de $X = 0.01$, c'est-à-dire 2λ . Cela provient du comportement du terme $e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X}{\lambda} \right)^2} - 1$, qui converge vers $-\frac{1}{2} \left(\frac{X}{\lambda} \right)^2$ quand X tend vers 0, et vers 0 quand X tend vers $+\infty$. Comme précédemment (section IV.3.2), l'étalement optimal X des bactéries diminue lorsque le coefficient de diffusion du substrat d_{diff} augmente. La relation entre X et d_{diff} est représentée sur la **Figure IV.14**, au côté des relations trouvées précédemment.

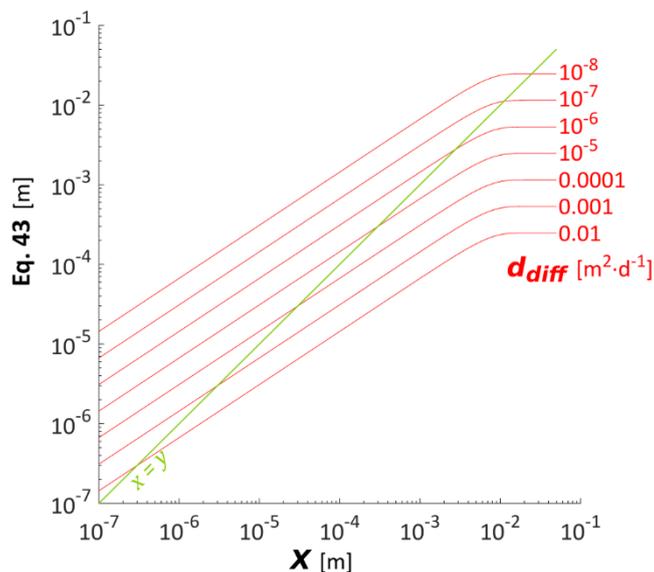


Figure IV.13. Représentation graphique des solutions de l'Éq 63. La droite verte $x = y$ représente le terme de gauche de l'équation. Les courbes rouges représentent le terme de droite pour différentes valeurs du coefficient de diffusion du substrat d_{diff} .

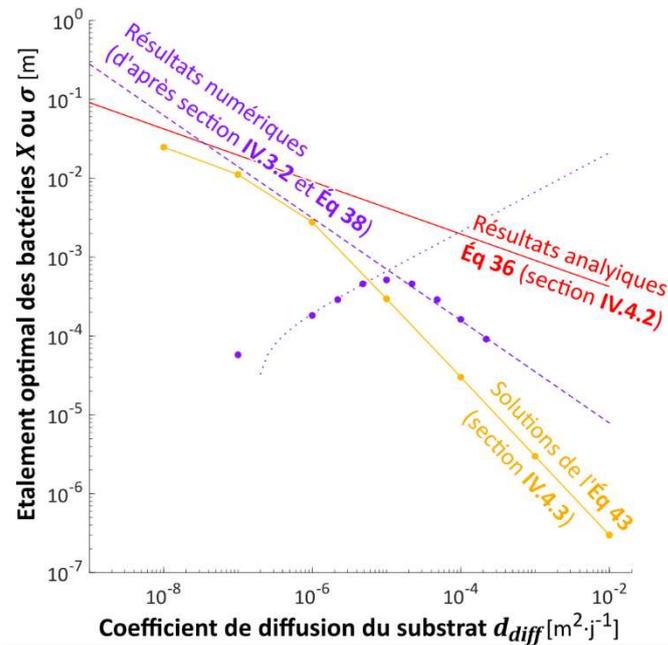


Figure IV.14. Relations entre l'étalement optimal des bactéries et le coefficient de diffusion du substrat. Les résultats numériques obtenus à la section IV.2.2 sont représentés en violet, en remplaçant le coefficient de dispersion optimale des bactéries $^{optim}d_{disp}$ ($m^2 \cdot j^{-1}$) par leur étalement optimal σ (m), d'après la formule $\sigma = \sqrt{6 d_{diff} \Delta t}$ utilisée dans l'Éq 59, en considérant un temps arbitraire $\Delta t = 1/100$ j. Les points représentent les résultats de simulations tandis que les lignes en pointillés représentent les calibrations ajustées sur ces données. Les résultats analytiques obtenus dans la section IV.3.2 (Éq 57) sont représentés par la courbe rouge. En jaune sont représentées les solutions de l'équation Éq 63 développée analytiquement dans cette section (IV.3.3).

Points clés

► Le développement analytique d'une relation entre la dispersion optimale des bactéries, la diffusivité du substrat et l'efficacité maximale d'absorption des bactéries a permis l'obtention d'une équation dont la forme se rapproche de la loi de puissance inverse identifiée dans la section IV.2.

IV.4. Généralisation spatiale

Avant de pouvoir étudier la généralisation des résultats précédents à des échelles spatiales différentes, il est apparu qu'il était tout d'abord nécessaire de déterminer l'influence de la source de substrat, plus précisément sa concentration et son comportement (ponctuel ou permanent). Ces deux aspects sont étudiés ici dans les deux premières sous-sections (IV.4.1 et IV.4.2), puis serviront à l'étude de la généralisation spatiale des résultats, dans les trois sous-sections suivantes (IV.4.3, IV.4.4 et IV.4.5).

IV.4.1. Impact de la concentration initiale en substrat

Dans les deux séries d'expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018), la concentration initiale en 2,4-D équivaut respectivement à 6× et 47× la dose agronomique habituelle. Les concentrations rencontrées dans les sols cultivées peuvent donc être très différentes des valeurs testées dans cette thèse. De plus, la généralisation des résultats précédents à la dégradation de molécules organiques autres que le 2,4-D nécessite également de considérer une gamme plus vaste de concentrations initiales. Avant de transposer les résultats précédents à différents systèmes, il apparaît pertinent d'étudier l'impact de la concentration initiale en carbone. Cet impact sera analysé ici de manière générique en incluant dans le criblage des paramètres trois valeurs de concentration initiale en substrat : la valeur considérée précédemment, prise comme référence, une valeur 10× plus faible et une valeur 10× plus élevée.

Un jeu réduit de paramètres a été choisi (**Tableau 5**), en éliminant la plus faible valeur de vitesse maximale de croissance μ_{max}/y et les deux plus faibles valeurs d'efficacité maximale de croissance $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$, car les minéralisations correspondantes simulées précédemment peuvent être considérées comme négligeables (inférieures à 1% de la masse initiale de substrat). Les deux plus faibles valeurs de vitesse d'accommodation α ont également été retirées, à cause des difficultés à interpréter la cinétique de minéralisation lorsque celle-ci est soumise à un retard supérieur à 50 j.

relations de Monod respectivement pseudo-proportionnelle et pseudo-indépendante de la concentration en substrat (voir également **Figure II.13**).

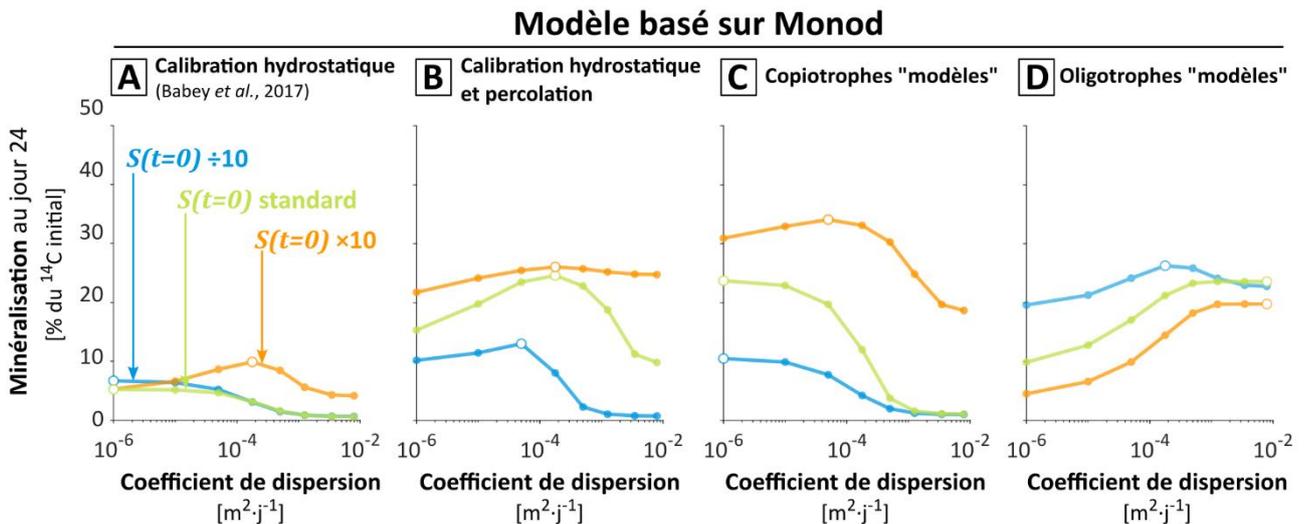


Figure IV.15. Impact de la dispersion hydrodynamique du substrat sur la minéralisation à 24 jours en fonction de la concentration initiale en substrat $S(t=0)$, pour l'expérience colocalisée en percolation. Les cas correspondant au substrat dilué 10×, non-dilué, et concentré 10× sont indiqués respectivement en bleu, vert et orange. La dispersion optimale est indiquée par un point blanc. Quatre jeux de paramètres biologiques caractéristiques sont représentés : la calibration hydrostatique (A), la calibration en hydrostatique et percolation (B), les copiotrophes « modèles » (C) et les oligotrophes « modèles » (D). Les valeurs de paramètres correspondant aux deux premiers sont rappelées dans le **Tableau 5** précédent, et les valeurs des deux derniers sont présentées sur la **Figure III.4**. À noter que la relation de Monod pour les copiotrophes modèles est pseudo-proportionnelle à la concentration en substrat, tandis qu'elle est pseudo-indépendante de la concentration en substrat pour les oligotrophes modèles.

La **Figure IV.16** montre les résultats sur l'ensemble du criblage réduit présenté précédemment. La dispersion optimale est généralement plus basse lorsque la concentration initiale en substrat est diluée, comme le montre la prévalence des points bleus à droite de la diagonale dans le graphique A. Sur le graphique B, à l'opposé, bien que la majorité des jeux de paramètres montrent une dispersion optimale plus haute lorsque la concentration initiale en substrat est augmentée, de nombreux cas montrent également une dispersion optimale plus basse. Cependant, ici, la présence de points à droite de la diagonale est un artefact qui apparaît lorsque la minéralisation est similaire pour plusieurs valeurs de dispersion. En effet, les hautes concentrations initiales en substrat favorisent les situations où la minéralisation converge au-delà d'une certaine valeur de dispersion, conduisant à l'émergence de plusieurs dispersions optimales quasiment équiprobables, comme cela est le cas par exemple pour les trois dernières valeurs de dispersion des courbes verte et orange de la **Figure IV.15D**. Dans ces cas-là, la dispersion optimale exacte devient sensible aux très faibles fluctuations de minéralisations dues à des processus mineurs, notamment

l'interaction de la concentration initiale en substrat et de la géométrie du milieu. Ces variations ne traduisent néanmoins pas de changement visible de minéralisation.

La tendance de croissance de la dispersion optimale avec la concentration initiale en substrat s'explique par le fait que la dispersion optimale des bactéries correspond à un équilibre entre la régulation de l'activité des bactéries par la dilution du substrat et par la densité en bactéries. La diminution de la concentration initiale en substrat accentue la limitation de l'activité bactérienne par la dilution du substrat, favorisant ainsi l'agrégation des bactéries à proximité des plus hautes concentrations en substrat (proches du centre). À l'inverse, l'augmentation de la concentration initiale en substrat accentue la multiplication des bactéries et donc leur compétition locale, rendant ainsi leur dispersion plus favorable.

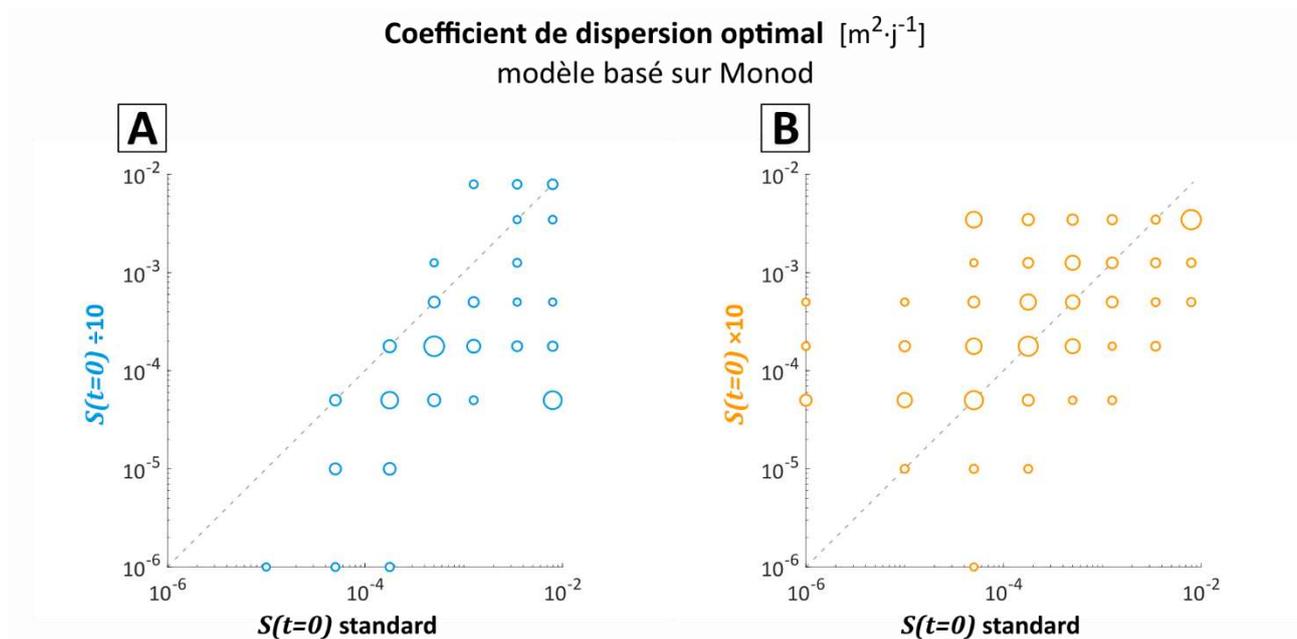


Figure IV.16. Impact de la concentration initiale en substrat sur la dispersion optimale des bactéries. Sur les axes des ordonnées, les dispersions optimales lors d'une concentration initiale en substrat diluée 10× (en bleu, **A**) ou concentrée 10× (en orange, **B**) sont comparées aux dispersions optimales lors d'une concentration initiale intacte (axe des abscisses). La taille des cercles indique le nombre de jeux de paramètres concernés. La ligne grise en pointillés représente les cas où la dispersion optimale ne varie pas suivant la concentration initiale en substrat.

IV.4.1.2. Impact sur la performance de minéralisation

Il a été montré que l'augmentation de la concentration initiale en substrat favorisait la croissance des bactéries, ce qui conduisait généralement à un meilleur rendement de dégradation après un certain temps, essentiellement au-delà de deux semaines dans le système étudié ici (Babey et al., 2017). Néanmoins, les résultats montrent ici que l'impact de la concentration initiale en substrat sur le rendement final de minéralisation n'est pas systématiquement bénéfique, en fonction des jeux de paramètres. Dans certains cas, l'augmentation de $S(t=0)$ entraîne une augmentation de la minéralisation (**Figure IV.15B** et

C), dans d'autres cas une diminution (**Figure IV.15D**), quand d'autres cas encore montrent un comportement non monotone (**Figure IV.15A**). En reprenant les termes introduits dans le **Tableau 3** de la section III.1.5, le premier cas correspond à des bactéries dont l'activité est limitée principalement par la concentration en substrat. Cela s'applique à des bactéries dont l'efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$ est plutôt faible par rapport à la concentration en substrat, et la vitesse maximale d'absorption μ_{max}/y plutôt élevée (**Figure IV.17**), ce qui conduit à un régime de dégradation pseudo-proportionnel du substrat. L'augmentation de la concentration initiale en substrat a pour effet de lever cette limitation par la concentration en substrat, c'est-à-dire d'augmenter la vitesse d'absorption des bactéries, favorisant leur croissance. C'est au final la croissance plus forte des bactéries qui accélère la minéralisation, en proportion du substrat initial. Comme vu précédemment, cette croissance s'accompagne d'une augmentation de l'hétérogénéité spatiale, conduisant à rendre la dispersion des bactéries de plus en plus favorable. Le deuxième cas correspond à des bactéries qui ne sont, au contraire, pas ou peu limitées par la concentration en substrat. Cela concerne des bactéries dont l'activité est limitée par la compétition locale entre bactéries, ainsi que par la saturation par le substrat (Shi et al., 2021), toutes deux causées par une efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/K_M$ élevée par rapport à la concentration en substrat ainsi qu'une vitesse maximale d'absorption μ_{max}/y faible (**Figure IV.17**).

En particulier, la comparaison entre les graphiques **C** et **D** de la **Figure IV.15** illustre très clairement le compromis entre une vitesse maximale élevée d'absorption (**C**) et une efficacité maximale élevée d'absorption (**D**). La première stratégie, assimilée aux bactéries copiotrophes, est plus efficace aux hautes concentrations de substrat tandis que la deuxième stratégie, assimilée aux oligotrophes, est plus efficace aux basses concentrations de substrat.

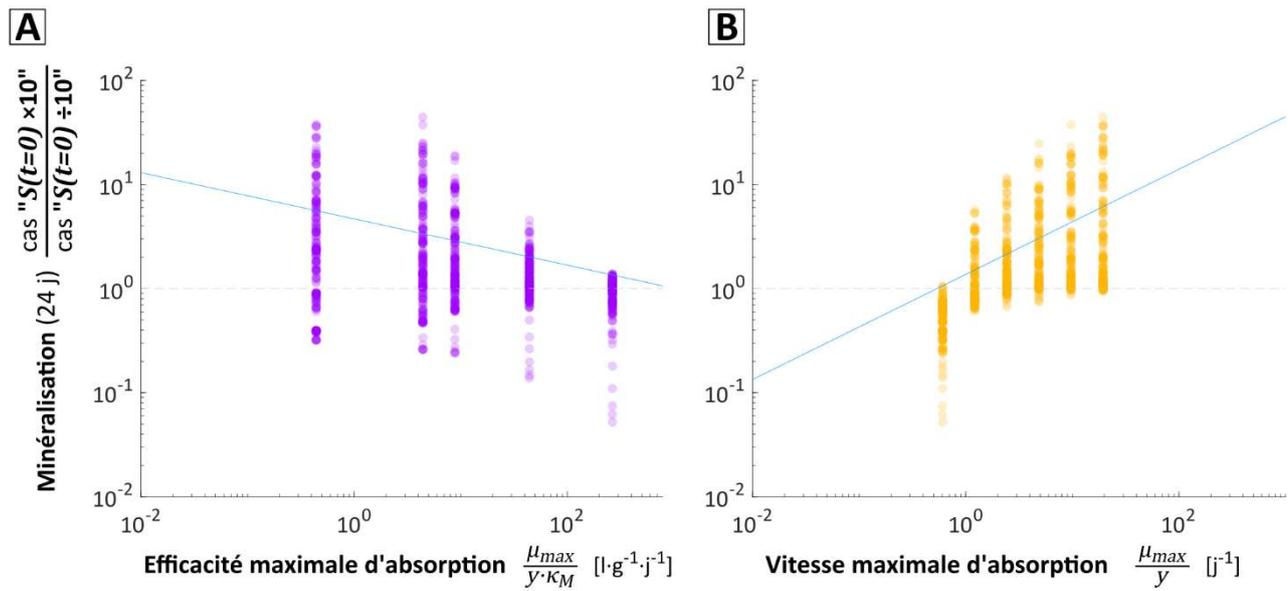


Figure IV.17. Impacts couplés de la concentration initiale en substrat et des paramètres biologiques. Les résultats montrent les minéralisations à 24 jours obtenues avec les dispersions optimales, selon un modèle basé sur Monod. La ligne en pointillés gris indique la limite en-deçà de laquelle l'augmentation de $S(t=0)$ diminue la minéralisation finale. Les lignes bleues (lois de puissance les plus adéquates) indiquent les relations respectivement décroissante et croissante entre les deux paramètres biologiques et l'impact de $S(t=0)$ sur la minéralisation à 24 jours. À noter que la vitesse d'accommodation α et la densité initiale en bactéries $B(t=0)$ n'exercent pas une influence significative sur l'impact de la concentration initiale en substrat.

IV.4.2. Impact de la finitude de la source de substrat

Au-delà de la concentration initiale du substrat, une autre caractéristique majeure de la source de substrat est la description de sa dynamique temporelle. Dans les sols, certaines sources de matière organique sont ponctuelles, correspondant à un apport éphémère de substrat à un endroit donné, dû par exemple à la percolation d'une solution de substrat jusqu'à un pore du sol, à partir duquel la quantité finie de substrat contenue dans ce volume va diffuser dans les films d'eau environnants. C'est ce type de situation qui a été exclusivement prise en compte dans les expériences numériques de cette thèse jusqu'à présent. À l'opposé, certaines sources de matière organique dans les sols sont durables, due par exemple à la présence d'une particule de matière organique dont la surface est progressivement hydrolysée sous l'action d'exoenzymes, fournissant dans le milieu une concentration en substrat dissout relativement stable au cours du temps. Pour étudier cette situation, un système simplifié est testé, dans lequel la concentration initiale en substrat est imposée à une valeur fixe. Le comportement qui en résulte, et sa convergence vers un état d'équilibre, est étudié ici.

L'état d'équilibre est étudié en simulant les dynamiques sur plusieurs dizaines de jours, les dynamiques tardives se rapprochant d'un régime permanent. Dans ce type de système, la dispersion optimale est apparue plus variable, et sa convergence plus difficile à déterminer que dans le cas d'une concentration en substrat finie. Pour éviter d'accentuer la variabilité de la dispersion optimale, il est apparu nécessaire d'effectuer les simulations en domaine spatial élargi (voir section IV.4.3) et avec une dispersion continue des bactéries, sans tenir compte de processus de lixiviation.

IV.4.2.1. Impact sur la dispersion optimale des bactéries

La durée simulée, la taille du domaine et le nombre de valeurs de dispersion testées ont rendu les résultats plus difficiles à produire, en particulier pour les jeux de paramètres incluant une efficacité maximale d'absorption élevée. Néanmoins des résultats partiels ont pu être obtenus pour des efficacités variées, et sont présentés dans la **Figure IV.18**. Par comparaison avec le système équivalent mais avec une source ponctuelle de substrat, ces résultats semblent montrer que l'existence d'une dispersion optimale, c'est-à-dire une dispersion des bactéries maximisant la dégradation, reste valide, de même que sa convergence temporelle. Cette dispersion optimale est par ailleurs bien démarquée, et correspond à l'état d'équilibre du système (bien que dans les simulations l'équilibre ne soit pas rigoureusement atteint, voir **Figure IV.21**). Le passage d'un substrat ponctuel à un substrat permanent semble augmenter la dispersion optimale dans certains cas (**Figure IV.18A** et **B**) et la diminuer dans d'autres (**Figure IV.18C** et **D**). Ces résultats semblent ainsi présager que la relation globalement croissante entre l'efficacité maximale d'absorption et la dispersion optimale, mise en lumière dans la section III.1.2 pour une source ponctuelle de substrat, soit différente dans le cas d'une source permanente de substrat.

Source ponctuelle de substrat

Source permanente de substrat

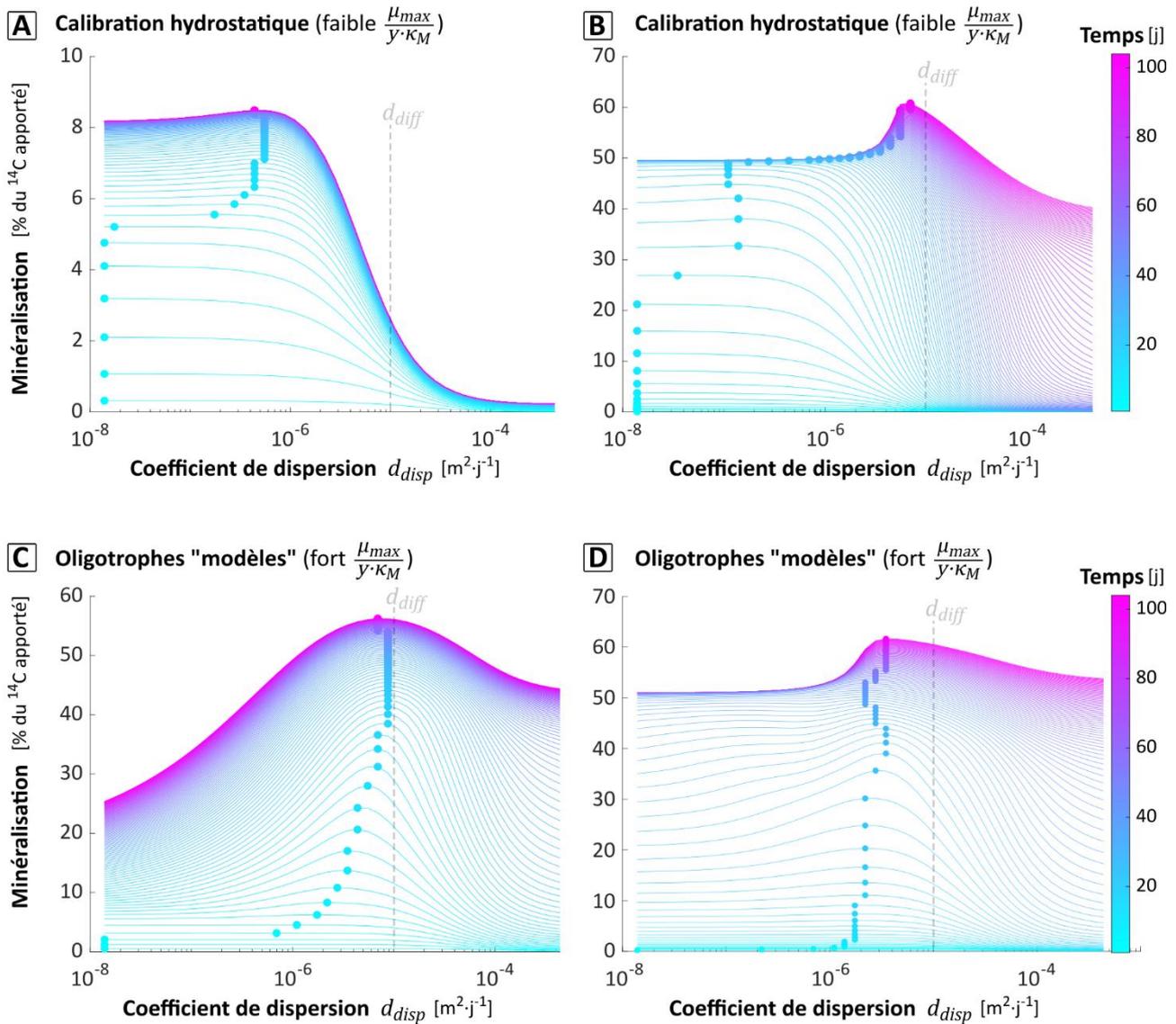


Figure IV.18. Convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps, pour le modèle de Monod avec un domaine élargi (se référer à la **Figure IV.2**). Les relations sont montrées pour chaque jour, indiqués par l'échelle de couleurs. Le coefficient de diffusion du substrat est indiqué en gris clair. Les dispersions optimales pour chaque jour sont indiquées par les points. Le jeu de paramètres du modèle calibré hydrostatique est rappelé dans le **Tableau 5**. Le jeu de paramètre du « modèle » d'oligotrophes est présenté dans la **Figure III.4**.

Il est à noter que ces résultats apparaissent après un temps relativement long. Au contraire, au cours des premières semaines, on observe peu de différence de dispersion optimale en fonction de la nature ponctuelle ou permanente de la source de substrat (**Figure IV.19A**, en particulier pour la calibration hydrostatique et les oligotrophes modèles, pour lesquels les résultats sont plus complets). Les paramètres biologiques correspondants sont rappelés dans la **Figure IV.20**. La **Figure IV.19B** montre quant à elle la relation entre la dispersion et

le temps à partir duquel la concentration en substrat dissout devient négligeable. On peut noter deux comportements. En dessous d'une certaine valeur de dispersion la dispersion des bactéries ne change pas le temps nécessaire à l'instauration d'un profil de bactéries suffisant pour dégrader instantanément la totalité du substrat apporté dans la colonne de sol. Au-delà de cette valeur, l'augmentation de la dispersion retarde significativement ce temps.

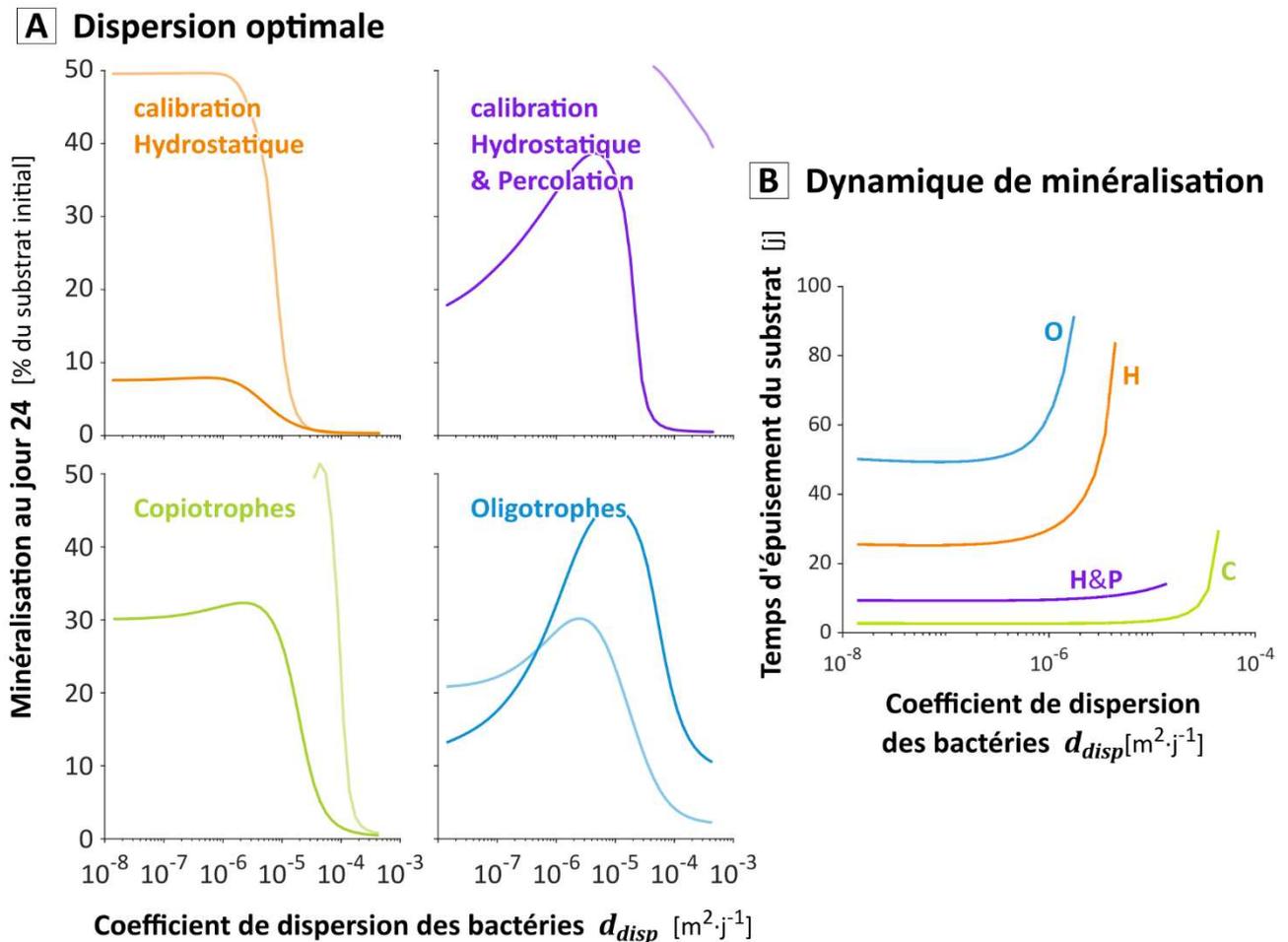


Figure IV.19. Compléments sur l'aspect temporel des impacts de la dispersion des bactéries sur la performance de minéralisation (A) et sur la précocité de la minéralisation (B), en fonction de la nature ponctuelle ou permanente de la source de substrat. Les résultats présentés correspondent à certains jeux de paramètres caractéristiques rappelés en Figure IV.20 suivante. Le graphique (A) représente la dispersion optimale des bactéries à 24 jours pour un substrat apporté de manière ponctuelle (traits opaques) ou permanente (traits transparents). Les données simulées sont parcellaires mais semblent indiquer une relative indépendance de la dispersion optimale envers la nature ponctuelle ou permanente de la source de substrat, au cours de ces premières semaines. Le graphique (B) représente le temps à partir duquel la concentration en substrat dans la colonne de sol devient négligeable, dans le cas d'une source de substrat permanente.

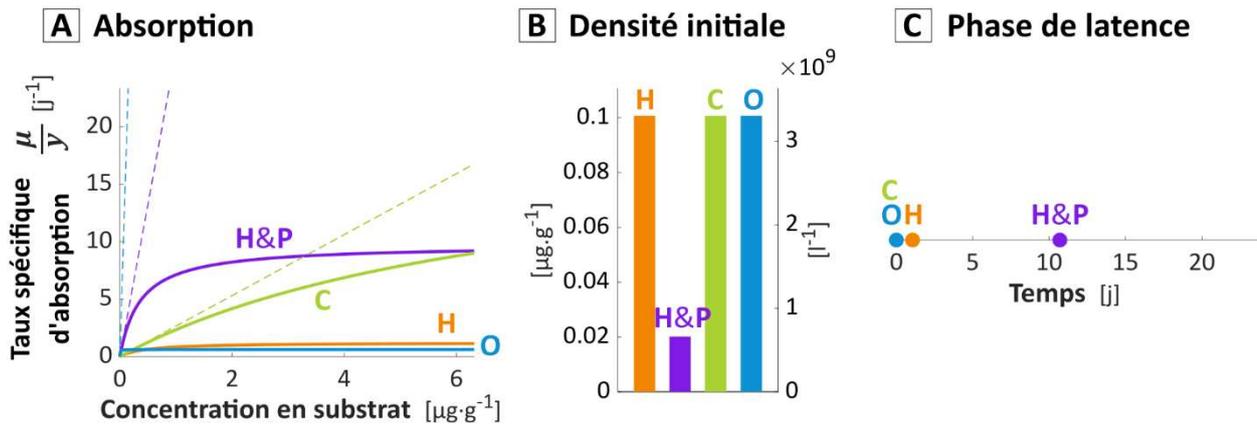


Figure IV.20. Visualisation des paramètres biologiques, pour les quatre jeux de paramètres caractéristiques mis en avant dans cette sous-section. Les paramètres calibrés (« H » et « H&P ») sont par ailleurs présentés dans la section III.1.2-3.1 (Table 2) et rappelés dans le Tableau 5, et les paramètres des oligotrophes et copiotrophes « modèles » (« O » et « C ») sont présentés dans la section III.1.4.2.

IV.4.2.2. Convergence et étendue des profils spatiaux de substrat et de bactéries

Les systèmes testés dans les simulations semblent tous converger vers un équilibre où la concentration en substrat dissout dans le système est quasi-nulle, signifiant que le substrat apporté en permanence est instantanément consommé dans les premiers millimètres du sol adjacents à la source de substrat (**Figure IV.21**). Cela rejoint de nombreuses observations sur l'étendue de la détritosphère¹ dans les sols. Ces études montrent en effet que le gradient spatial de concentrations en carbone dissout qui se crée autour des particules de matière organique est particulièrement stable, et que l'essentiel du carbone dissout se trouve dans les premiers millimètres autour des particules (Vedere et al., 2020). Il en découle également un gradient de densités bactériennes similaire. La convergence et la stabilité du profil de densités bactériennes est illustré sur la **Figure IV.22**. L'étendue plus large (plusieurs dizaines de mm) est potentiellement due à une quantité apportée de substrat beaucoup plus grande dans les simulations qu'en réalité. Il conviendrait de refaire les expériences numériques en remplaçant la concentration imposée en substrat par un flux constant de dépolymérisation de la particule organique.

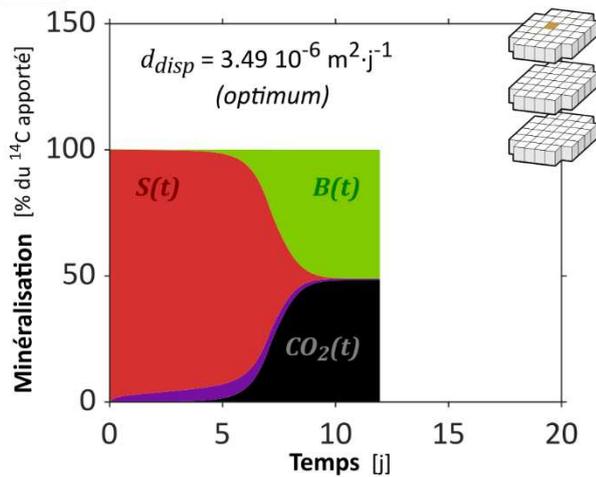
Gaillard et al. (2003) montrent que la dégradation a principalement lieu au contact de la particule de matière organique, et que cette zone adjacente à la particule est sensiblement plus riche en carbone et en bactéries, constituant ainsi un *hotspot* de dégradation (Vedere

¹ La détritosphère est l'appellation donnée à la sphère d'influence autour des particules de matière organique présentes dans le sol, décrite soit en termes de concentrations et de dynamiques qui se démarquent significativement du sol environnant, soit en termes de ruptures de gradients.

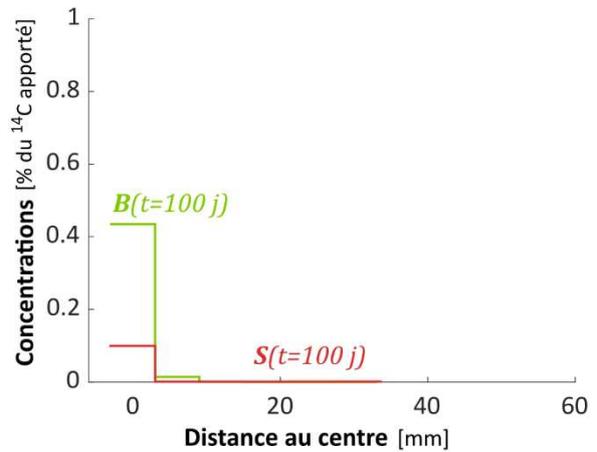
et al., 2020). Il est cependant à noter que les quantités de carbone et de bactéries dans cette zone adjacente, bien que supérieures à celles de l'ensemble des zones plus éloignées, restent dans le même ordre de grandeur. Par ailleurs, ces études ont été menées en géométrie linéaire. On peut imaginer qu'en géométrie radiale, le large volume de sol périphérique participe autant voire plus à la minéralisation globale que le volume restreint adjacent à la particule de matière organique. C'est du moins le cas dans les simulations, où le cube initial de 6 mm de large minéralise une quantité 3× moindre que le reste de la colonne de sol. Cette observation remet en cause la prévalence des *hotspots* et mérite ainsi d'être étudiée de manière plus approfondie.

Les bilans de masses et les profils spatiaux de concentrations (**Figure IV.21**) confirment l'idée que le passage d'une source de substrat ponctuelle à une source permanente efface les différences de stratégies écologiques des bactéries. En effet, la minéralisation des situations **B1** et **C1** est similaire, de même que les profils spatiaux de concentration en substrat et de densité de bactéries (**B2** et **C2**), malgré que les deux jeux de paramètres représentés sont représentatifs respectivement de bactéries copiotrophes (**B**) et oligotrophes (**C**). On peut considérer que cela va dans le sens d'une valeur « universelle » d'étendue de la détritosphère, telle que cela a généralement été mesuré. Néanmoins, Vedere et al. (2020) montrent que la composition des communautés microbiennes suit une organisation concentrique autour des particules de matière organique, ce qui au contraire semble indiquer que les profils de densité des différents types de dégradeurs suivent une organisation spécifique.

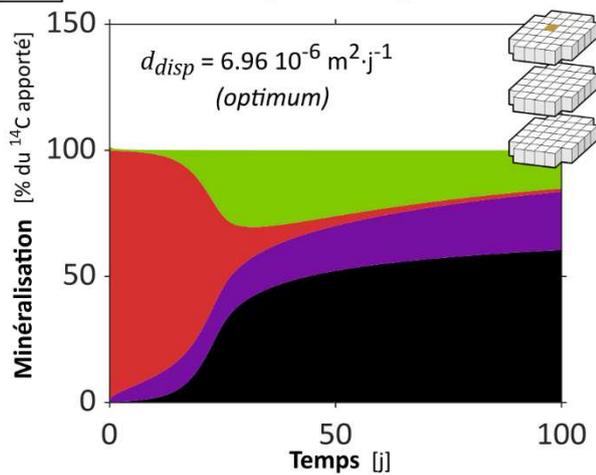
A1 Calibration hydrostatique & percolation



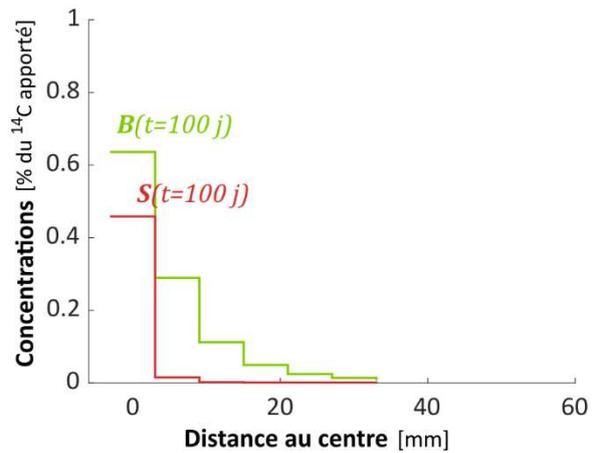
A2



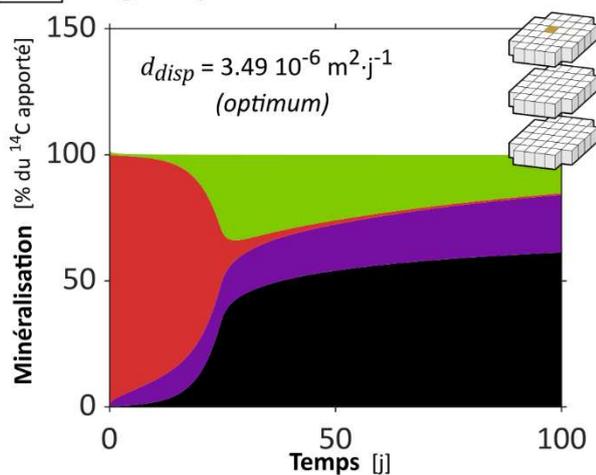
B1 Calibration hydrostatique



B2



C1 Oligotrophes "modèles"



C2

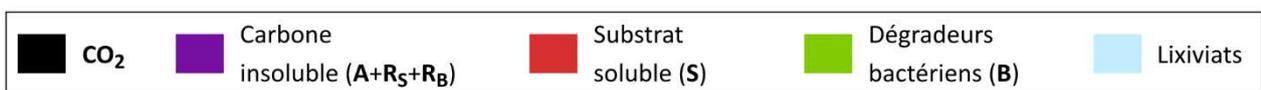
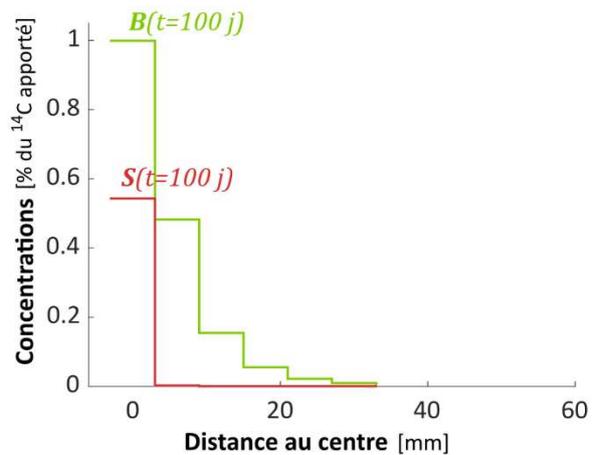


Figure IV.21. Bilans de masse de carbone (A1, B1, C1) et profils spatiaux de concentration en substrat et de densité de bactéries (A2, B2, C2). Les résultats présentés correspondent à certains jeux de paramètres caractéristiques, représentés sur la **Figure IV.18** précédente. Les couleurs des courbes cumulées sur les graphiques de bilans de masse (A1, B1, C1) indiquent la répartition du carbone au sein des quatre compartiments pris en compte dans le modèle de la **Fig. 2** (section III.1.2). Les profils représentés sur les graphiques A2, B2, C2 correspondent à des profils qui s'approchent d'un état d'équilibre (voir également **Figure IV.22**). Le substrat est presque uniquement présent dans le cube de sol où il est imposé.

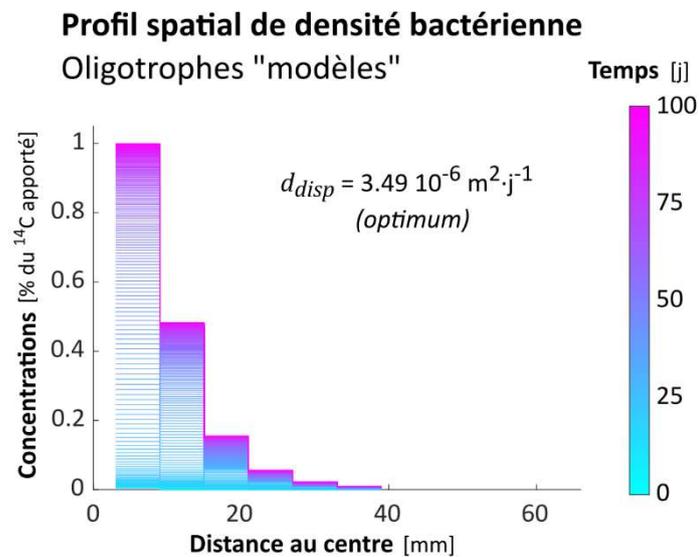


Figure IV.22. Convergence du profil spatial de densité bactérienne pour des bactéries oligotrophes. Le temps est indiqué par l'échelle de couleur. Ces résultats correspondent à l'évolution temporelle du profil de densité bactérienne représenté après 100 jours sur la **Figure IV.21C2** (courbe verte).

IV.4.3. Extrapolation à partir d'un système spatial unitaire

La colonne de sol centimétrique mise en place dans Pinheiro et al. (2015) peut constituer une unité élémentaire de sol représentant un hotspot de dégradation et sa zone d'influence. L'extrapolation des cinétiques des unités élémentaires au sol tout entier peut se faire en envisageant les unités élémentaires comme des motifs pavant l'espace. Les limites réfléchissantes aux bords de la colonne de sol correspondent à un pavage idéal où les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire que les concentrations au bord du domaine élémentaire sont identiques avec celles des domaines adjacents. La taille caractéristique des unités élémentaires, ici 5 cm, est donnée par la distance entre deux *hotspots* de dégradation à l'échelle locale. Vieublé Gonod et al. (2003) ont montré que la dégradation du 2,4-D était répartie de manière hétérogène spatialement à l'échelle de quelques centimètres. Plus généralement, comme discuté plus en détails dans la section I.2.2, l'hétérogénéité spatiale de la minéralisation de la matière organique du sol s'observe à toutes les échelles, et c'est une simplification importante que de considérer que le sol est constitué de systèmes élémentaires d'amplitude identique et parfaitement espacés. Par ailleurs, la mise à l'échelle d'un sol, et a fortiori d'une parcelle, doit prendre en compte la distribution de densité des bactéries et plus encore des autres éléments constitutifs des sols (racines, champignons, horizons, etc.). Néanmoins, l'extrapolation des résultats de la colonne de sol à l'ensemble du sol, sur la base de conditions aux limites périodiques, constitue un point de départ acceptable.

Avant de pouvoir explorer la variabilité du pavage du sol, il est nécessaire de se questionner sur l'impact de l'étendue spatiale d'un motif élémentaire. Comme cela a été abordé dans les sections IV.1.2 et IV.2.2 et utilisé dans les sections précédentes IV.4.2, un domaine spatial étendu a été inclus dans les simulations, mesurant cette fois 9 cm de large. L'impact de la taille du domaine spatial est illustré sur la **Figure IV.23**. Les limites spatiales du domaine plafonnent l'impact de la dispersion d_{disp} des bactéries et du substrat. En effet, au-delà d'une certaine valeur, la dispersion a pour effet d'homogénéiser complètement les concentrations du domaine. Dès lors, continuer à augmenter les coefficients de dispersion ne modifie plus leur impact sur la minéralisation (**Figure IV.23A**, courbes roses qui tendent à s'aplanir). Lorsque le domaine est petit, ce seuil de dispersion est atteint pour des valeurs relativement petites de d_{disp} . À l'inverse, plus le domaine est étendu, plus l'homogénéisation nécessite des valeurs élevées de dispersion. Dans le cas de figure général où la dispersion est favorable à la minéralisation jusqu'à un certain seuil (dominance de la limitation de l'activité spécifique bactérienne par la compétition), puis défavorable au-delà de ce seuil (dominance de la limitation de l'activité spécifique bactérienne par la dilution du substrat), l'exiguïté du domaine peut masquer l'impact défavorable des valeurs élevées de dispersion. En d'autres termes, plus le domaine est étendu, plus la gamme de dispersions qu'il est possible de représenter est large et peut ainsi inclure des valeurs de dispersions d_{disp} élevées qui défavorisent la minéralisation (**Figure IV.23B**). Cela revient à dire que l'étendue du domaine spatial offre les conditions nécessaires à l'expression de l'impact limitant de la dilution du

substrat (Babey et al., 2017). L'élargissement du domaine spatial fait tendre ce milieu vers un milieu ouvert, dans lequel les « pertes » de substrat limitent significativement la dégradation (Ebrahimi et al., 2019).

Des conclusions opposées peuvent être conjecturées quant à l'impact de la taille de la zone initialement amendée en substrat.

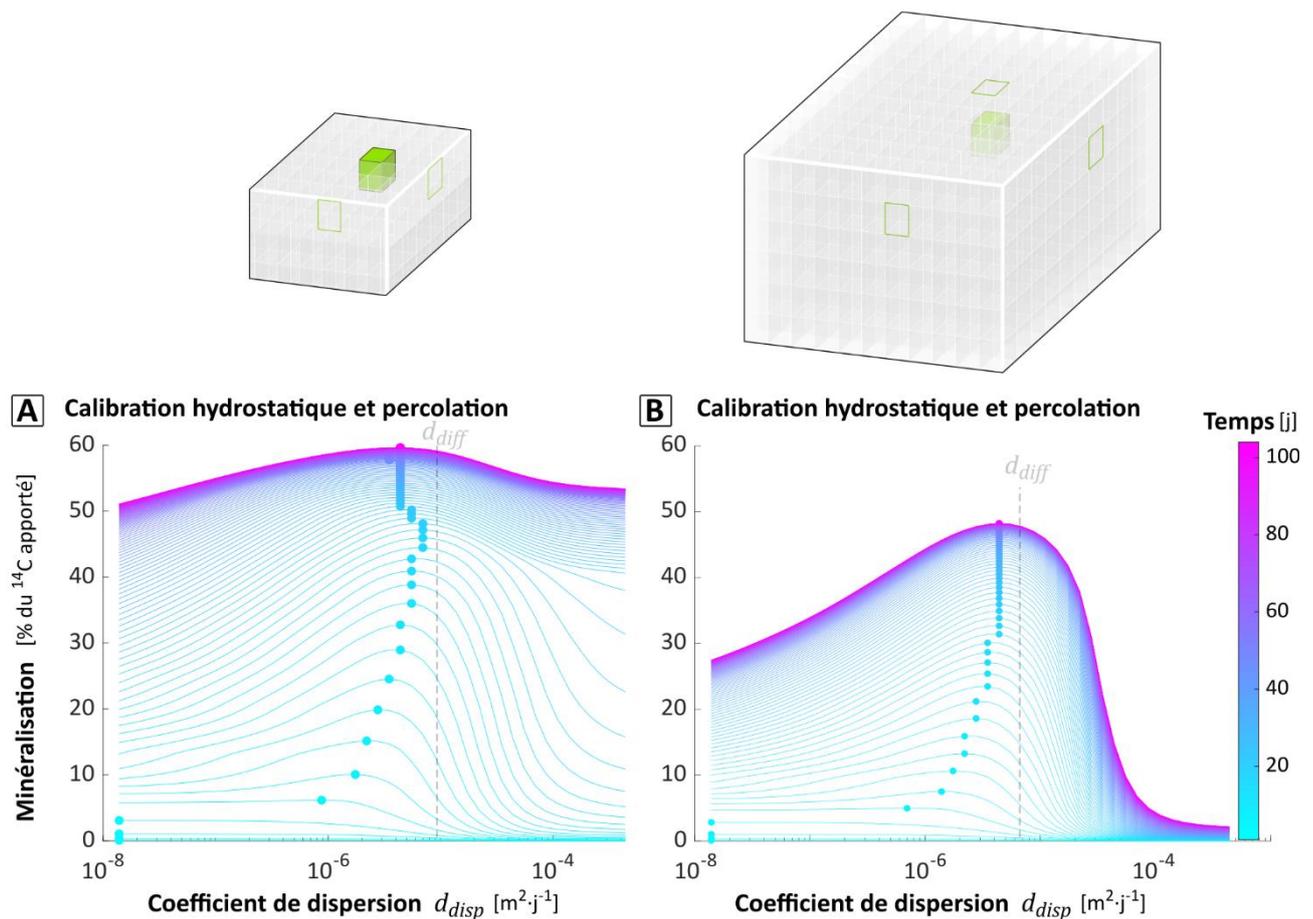


Figure IV.23. Illustration de l'influence de l'agrandissement du domaine spatial sur l'optimum de dispersion des bactéries. Les résultats sont présentés pour le modèle de Monod calibré en hydrostatique et percolation, dans un domaine spatial standard (A) ou étendu (B), avec une dispersion continue des bactéries. Les relations sont montrées pour chaque jour, indiqués par l'échelle couleur. La convergence de l'optimum du coefficient de dispersion d_{disp} avec le temps est indiquée par les points. Le coefficient de diffusion du substrat est indiqué en gris clair.

IV.4.4. Échelle spatiale de la compétition pour le substrat

Cette partie s'attache à déterminer l'échelle spatiale à laquelle il est pertinent de considérer l'effet de la compétition pour le substrat entre bactéries d'une même population. Cette sous-section présente les solutions analytiques des gradients de concentrations dans le cas d'une bactérie isolée, mais peuvent être extrapolées à des groupements de bactéries.

Plusieurs solutions analytiques de systèmes combinant diffusion et dégradation existent, notamment en géométrie radiale et dans le cas d'une dégradation instantanée. On peut tout d'abord noter la solution donnée par Koch (1971) en géométrie radiale dans le cas idéal d'une bactérie absorbant instantanément toute molécule en contact avec sa surface (efficacité maximale d'absorption égale à la limite collisionnelle, voir section III.1.3–S.5). Cette solution décrit le profil spatial de la concentration en substrat $S(x)$ à l'équilibre, cette dernière étant imposée à une distance x infinie de la bactérie à une valeur S_L ($\lim_{x \rightarrow \infty} (S(x)) = S_L$). La solution est donnée par l'équation :

$$S(x) = S_L \left(1 - \frac{R}{x}\right) \quad \text{Éq 64}$$

où R est le rayon de la bactérie considérée. La **Figure IV.24A** illustre cette solution décrivant le profil spatial de substrat dans l'espace (courbe violette). Cette solution est une solution particulière de la solution générale donnée par Crank (1975) :

$$S(x) = S_R \frac{R}{x} \frac{L-x}{L-R} + S_L \left(1 - \frac{R}{x}\right) \frac{L}{L-R} \quad \text{Éq 65}$$

où S_R représente la concentration en substrat à la surface de la bactérie ($x = R$), qui dépend alors des cinétiques bactériennes de dégradation du substrat et de la capacité du substrat à diffuser. Le cas où la concentration S_R à la surface de la bactérie vaut zéro est illustré sur la **Figure IV.24A** par la courbe violette comme décrit précédemment lorsque la concentration S_L en substrat est imposée à l'infini, ou par la courbe rouge-orange lorsque la concentration S_L est imposée à une distance L finie de la bactérie. Le cas où $S_R = S_L/3$ est illustré par la courbe jaune. L'amplitude du gradient de substrat (rapport S_R/S_L), et par conséquent le transfert de masse du substrat vers la bactérie, dépend de l'efficacité spécifique d'absorption maximale $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$, du coefficient de diffusion d_{diff} , de la distance à laquelle cette concentration est imposée, et de la distance entre les bactéries (Harms and Bosma, 1997). D'après Crank (1975), en système infini et en négligeant la saturation de l'activité des bactéries, la concentration S_R à la surface des bactéries est donnée par la formule suivante, en régime permanent :

$$\frac{S_L}{S_R} = \frac{m_B}{4\pi} \frac{\mu_{max}}{d_{diff} \kappa_M} \frac{1}{R} + 1 \quad \text{Éq 66}$$

avec m_B la masse de bactéries au centre du système. En considérant la plus haute efficacité maximale d'absorption $(1/y) \cdot \mu_{max}/\kappa_M$ utilisée dans le criblage, la concentration S_R induite par

une bactérie individuelle est égale à $0.87 \times S_L$ (**Figure IV.24A**, courbe bleue). À première vue, il semble que le gradient induit par une bactérie isolée soit donc relativement modéré et restreint spatialement. Au-delà de deux fois le rayon de la bactérie ($x > 2R$), le gradient de substrat devient quasiment négligeable, indiquant que l'impact d'une bactérie isolée sur la concentration en substrat est surtout critique dans le premier μm autour d'elle. Pourtant, il a été montré dans la section III.2.2 (**Tableau 4**) qu'une population de bactéries espacées de plusieurs dizaines de μm pouvait engendrer une déplétion totale du substrat dans la zone globale occupée par les bactéries, menant à une limitation sévère de la minéralisation par la compétition locale. Ainsi, même lorsqu'elles sont espacées de plusieurs dizaines de μm , l'effet cumulatif des actions individuelles de chaque bactérie sur la concentration en substrat induit un gradient en substrat qui s'étend alors à l'échelle de la population bactérienne tout entière. On peut supposer que cela soit dû au fait que, lors de son trajet effectué par diffusion moléculaire, une molécule de substrat rencontre successivement un nombre important de bactéries, chacune faisant écran à la diffusion du substrat. L'importance et l'échelle de la compétition pour le substrat dans les sols s'apprécie donc non pas au regard du gradient engendré par chaque bactérie isolée, ou groupe de bactéries isolé, mais bien au regard de l'effet global qui découle de la répartition de l'ensemble de la population bactérienne.

La section III mettait en évidence, à l'échelle millimétrique, le rôle majeur des déséquilibres spatiaux de compétition pour le substrat au sein d'une même population sur la minéralisation globale. Bien que cette expression de la compétition à l'échelle du mm résulte de l'impact des bactéries sur les concentrations en substrat à l'échelle du μm , et bien que les performances du modèle de Contois suggèrent d'étudier plus précisément la compétition à l'échelle du μm , les résultats de cette sous-section suggèrent que l'échelle à laquelle le déséquilibre spatial de compétition limite la minéralisation est liée d'une part à l'effet cumulatif d'occultation des bactéries, qui doit être suffisamment grand, d'autre part à l'échelle à laquelle il existe une hétérogénéité spatiale de densité bactérienne. Compte tenu de l'impact de l'échelle spatiale sur la vitesse de dilution, il serait particulièrement intéressant de vérifier si la répartition hétérogène de bactéries à l'échelle de la parcelle cultivée peut limiter la minéralisation globale par le même mécanisme de déséquilibre spatial de compétition.

Par ailleurs, les équations précédentes correspondent à une bactérie isolée sphérique, mais la forme des bactéries ou de leurs colonies ainsi que la géométrie des pores ont un impact sur le profil de concentration en substrat. A titre indicatif, les solutions précédentes sont également données pour une géométrie linéaire à une dimension (**Figure IV.24B** et Éq 67) et pour une géométrie cylindrique à deux dimensions (**Figure IV.24C** et Éq 68). Il est à noter que lorsque la concentration en substrat est imposée à une distance infinie (courbes violettes), seul le profil en trois dimensions (**A**) reste non nul.

$$S(x) = S_R + (S_L - S_R) \frac{x - R}{L - R} \quad 1\text{D} \quad \text{Éq 67}$$

$$S(x) = \frac{S_R \ln\left(\frac{L}{x}\right) + S_L \ln\left(\frac{x}{R}\right)}{\ln\left(\frac{L}{R}\right)} \quad \text{2D} \quad \text{Éq 68}$$

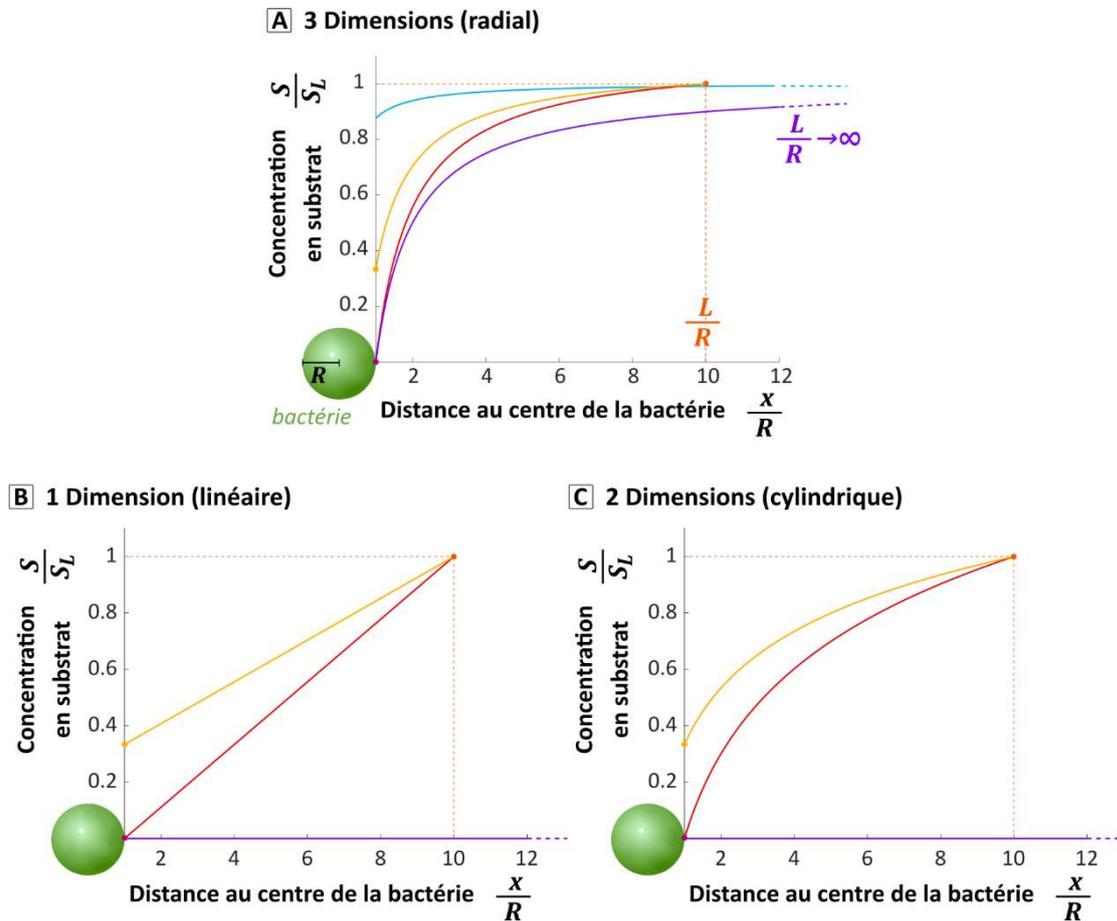


Figure IV.24. Profils spatiaux de concentration en substrat soumise à diffusion et dégradation, dans différents systèmes spatiaux. Trois géométries sont illustrées, radiale (A), linéaire (B) et cylindrique (C). La concentration en substrat est imposée en deux points situés à $x = R$, avec R le rayon de la bactérie, et $x = L$, avec L la longueur du domaine spatial, cette dernière pouvant prendre une valeur infinie (courbes violettes). L'impact de la concentration en $x = R$ est montré à travers deux modalités : $S_R = 0$ représentant une dégradation instantanée du substrat au contact de la bactérie (courbes rouges) et $S_R = S_L/3$ (courbes oranges), S_L étant la concentration imposée en L (ou en $+\infty$). Une troisième modalité est montrée en géométrie radiale (A) par la courbe bleue, correspondant au gradient réellement engendré par une bactérie très efficace.

Des solutions analytiques ont également été développées en régime transitoire, notamment l'Éq 69 qui généralise l'Éq 65, mais toujours sous la condition que les concentrations en substrat aux limites du système soient imposées (Carslaw and Jaeger, 1959; Crank, 1975). Néanmoins, ces solutions analytiques ne tiennent pas compte des particularités d'une absorption bactérienne du substrat de type Monod ni de la dynamique temporelle du profil

spatial de bactéries et de son impact sur le substrat. Ce sont ces deux aspects en particulier qui justifient le choix d'une résolution numérique telle que celle mise en œuvre dans cette thèse.

$$\begin{aligned}
 S(x) = & \frac{R S_R}{x} + \frac{(L S_L - R S_R)(x-R)}{x(L-R)} + \\
 & \frac{2}{x \pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{L S_L \cos(n\pi) - R S_R}{n} \sin\left(\frac{n\pi(x-R)}{(L-R)}\right) e^{-d_{diff} t \left(\frac{n\pi}{L-R}\right)^2} \right) + \\
 & \frac{2}{x(L-R)} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sin\left(\frac{n\pi(x-R)}{L-R}\right) e^{-d_{diff} t \left(\frac{n\pi}{L-R}\right)^2} \right) \int_R^L (x' S(x')) \sin\left(\frac{n\pi(x'-R)}{L-R}\right) dx'
 \end{aligned}
 \tag{Éq 69}$$

IV.4.5. Généralisation aux répartitions disjointes

Le modèle de transport bioréactif, utilisé jusqu'ici pour des répartitions initialement colocalisée, a été appliqué tel quel pour les répartitions initialement disjointes de bactérie et de substrat des expériences disjointes (voir **Figure II.1**). Bien que le jeu de paramètres biologiques précédemment calibré en hydrostatique et percolation fournisse une prévision raisonnable de la minéralisation finale pour les expériences disjointes, la dynamique de minéralisation n'est pas convenablement reproduite. Cela confirme ce qui avait été annoncé dans la section II.3.1, à savoir qu'il n'est pas possible de négliger la composante verticale du transport lorsque l'on cherche à reproduire l'expérience disjointe en percolation. Un modèle de transport plus réaliste apparaît pertinent à développer dans ce cas, afin de prendre en compte la composante du transport correspondant à l'advection macroscopique pure au sein de la colonne de sol, c'est-à-dire le déplacement groupé de l'ensemble du panache de substrat (et de bactéries). En effet, dans la présente thèse, bien que le terme « percolation » ait été choisi pour identifier les expériences numériques en conditions d'advection, du fait du rôle majeur de la percolation sur la dispersion hydrodynamique des bactéries, les autres aspects du transport advectif, tel que le déplacement du centre de masse des panaches de particules, ne sont pas étudiés. Il est toutefois raisonnable d'imaginer que la limitation de l'activité bactérienne par leurs trop fortes densités puisse être transposable en conditions advectives. Schmidt et al. (2018) ont par exemple montré par modélisation que la compétition locale engendrée par des colonies de bactéries trop agrégées pouvait sévèrement diminuer la dégradation globale dans des pores percolés par un écoulement d'eau.

Au-delà de reproduire les observations expérimentales des expériences disjointes, il est intéressant de regarder si les résultats et les conclusions établies précédemment dans cette thèse, en particulier la double régulation de l'activité des bactéries par la dilution du substrat et la densité de bactéries, sont également valides lorsque le substrat et les bactéries ne sont pas initialement colocalisées. Pour cela, un criblage a été réalisé sur les jeux de paramètres définis dans le **Tableau 5**, en faisant varier l'éloignement sur un même plan horizontal entre le cube initialement amendé en 2,4-D et le cube contenant les dégradeurs bactériens (**Figure IV.25**). La quantité initiale de substrat a été multipliée ici par 10 pour faire ressortir les optimums de dispersion.

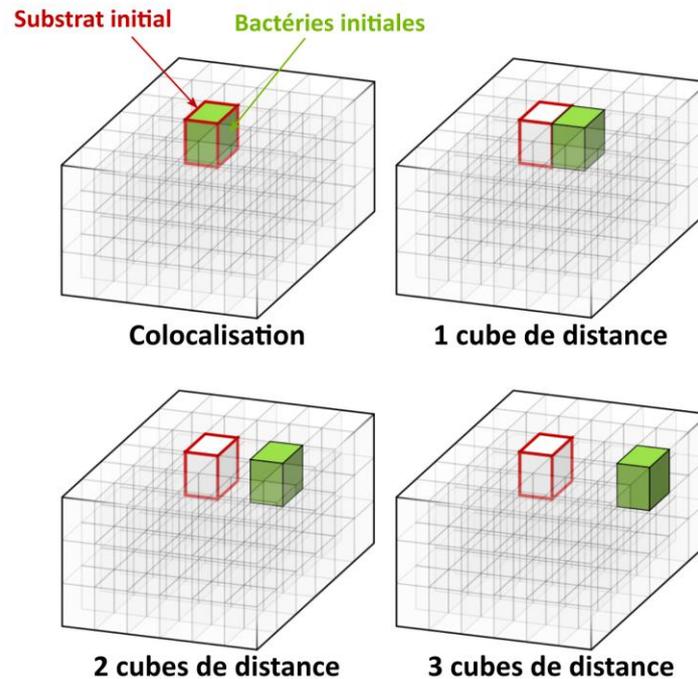


Figure IV.25. Répartitions spatiales initiales du substrat et des dégradeurs bactériens. Le substrat est indiqué en rouge et les bactéries en vert. Pour rappel, chaque cube mesure 6 mm de large et 10 mm de haut.

Les résultats de quelques jeux de paramètres caractéristiques sont représentés sur la **Figure IV.26**. Il en ressort tout d'abord que l'existence d'une dispersion optimale des bactéries reste valide, indiquant que l'équilibre entre les limitations par la dilution du substrat et par la compétition locale entre bactéries joue un rôle significatif même pour des bactéries initialement distantes du substrat initial. Le principal impact de l'éloignement entre les positions initiales de bactéries et de substrat réside dans la diminution de la minéralisation aux faibles dispersions de bactéries. La raison vient du fait que l'éloignement des bactéries de l'origine du substrat augmente la dilution du substrat perçu par ces bactéries. Au contraire, leur dispersion peut ici réduire partiellement cet effet. Cela a pour conséquence de déplacer la dispersion optimale des bactéries vers des valeurs plus grandes de coefficient de dispersion d_{disp} , quels que soient les paramètres biologiques.

Ainsi, dans un sol où les répartitions de bactéries et de substrat ne coïncident pas, la dispersion des bactéries pourrait avoir un effet universellement favorable à la minéralisation, soit en tempérant la limitation par la compétition locale dans le cas de bactéries efficaces, soit en tempérant la limitation par la dilution dans le cas de bactéries peu efficaces. La distance initiale entre bactéries et substrat dans un sol pourrait à terme être décrite plus rigoureusement en termes de corrélation spatiale, avec des métriques intégrées comme celles utilisées par exemple par Chakrawal et al. (2020).

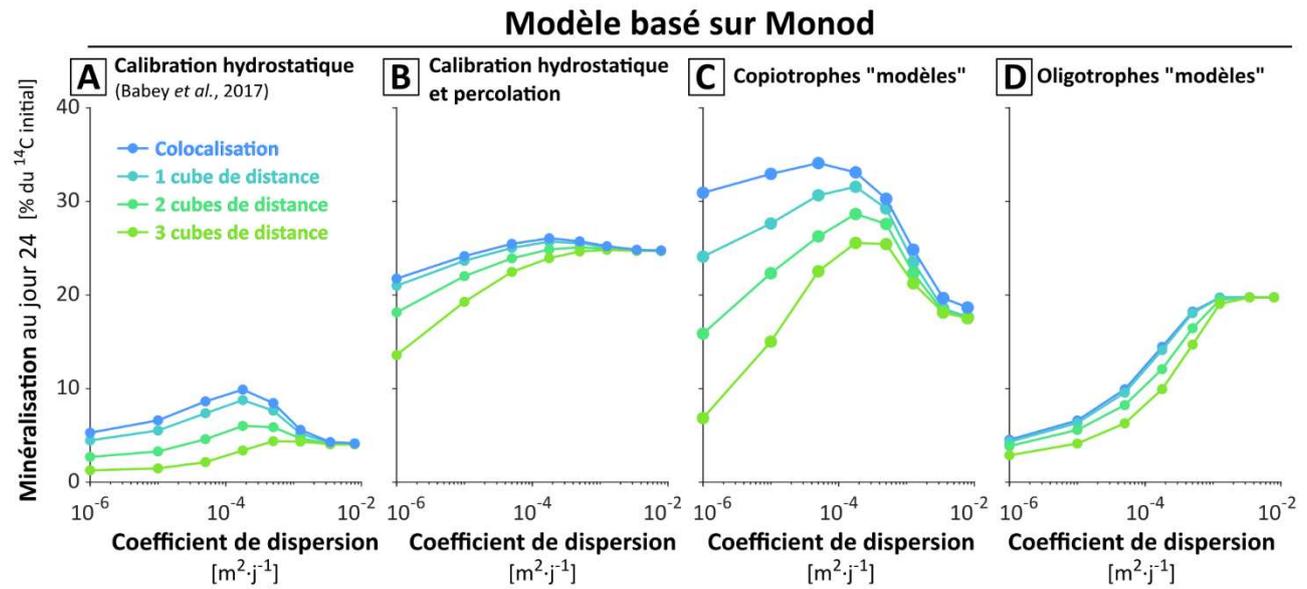


Figure IV.26. Impact de l'éloignement des localisations initiales de bactéries et du substrat sur la minéralisation finale en fonction de la dispersion des bactéries, pour quatre jeux de paramètres caractéristiques (A, B, C et D). Quatre distances sont représentées et indiquées par l'échelle de couleur allant du bleu au vert, conformément aux situations décrites sur la Figure IV.25. Il est à noter que, par rapport aux courbes de même type présentées dans la section III.3, la concentration initiale en substrat est ici multipliée par 10.

Points clés

- ▶ La masse totale de substrat dans la colonne de sol favorise la dispersion des bactéries, mais pas forcément la performance de minéralisation, qui varie selon que l'activité des bactéries est limitée par la concentration en substrat ou par d'autres facteurs tels que la compétition locale ou la saturation.
- ▶ La relation croissante entre l'efficacité maximale d'absorption et la dispersion optimale des bactéries ne semble pas être généralisable dans le cas d'une source de substrat permanente.
- ▶ L'influence des traits biologiques sur le comportement de systèmes soumis à une source permanente de substrat semble amoindrie.
- ▶ L'importance des *hotspots* dans la minéralisation du carbone organique du sol est à mettre en perspective avec la différence de volume entre le volume du sol adjacent aux particules de matière organique et le reste du volume du sol, généralement plus vaste de plusieurs ordres de grandeurs.
- ▶ L'extrapolation des résultats en colonne de sol à des échelles supérieures peut être approchée en considérant le sol comme un assemblage de *hotspots* indépendants. Cependant la pertinence de cette vision est limitée, notamment en lien avec le point précédent.
- ▶ Plus les sources de substrat sont rapprochées, moins l'effet de la dilution du substrat peut s'exprimer.
- ▶ Le gradient de concentration en substrat induit par une bactérie est vraisemblablement très faible. Mais le cumul de ces gradients individuels pour un grand nombre de bactéries, même espacées de plusieurs dizaines de μm , suffit pour créer une zone de haute compétition à une échelle macroscopique, du moins à l'échelle centimétrique.
- ▶ L'existence d'une dispersion optimale des bactéries est toujours valable, et même accentuée, dans le cas où les bactéries et le substrat sont initialement éloignés. La dispersion optimale tend alors à être plus élevée.

Résumé graphique du chapitre IV

La figure ci-dessous se propose de représenter de manière illustrative les relations soulevées dans ce chapitre, au sein du micro-environnement du sol.

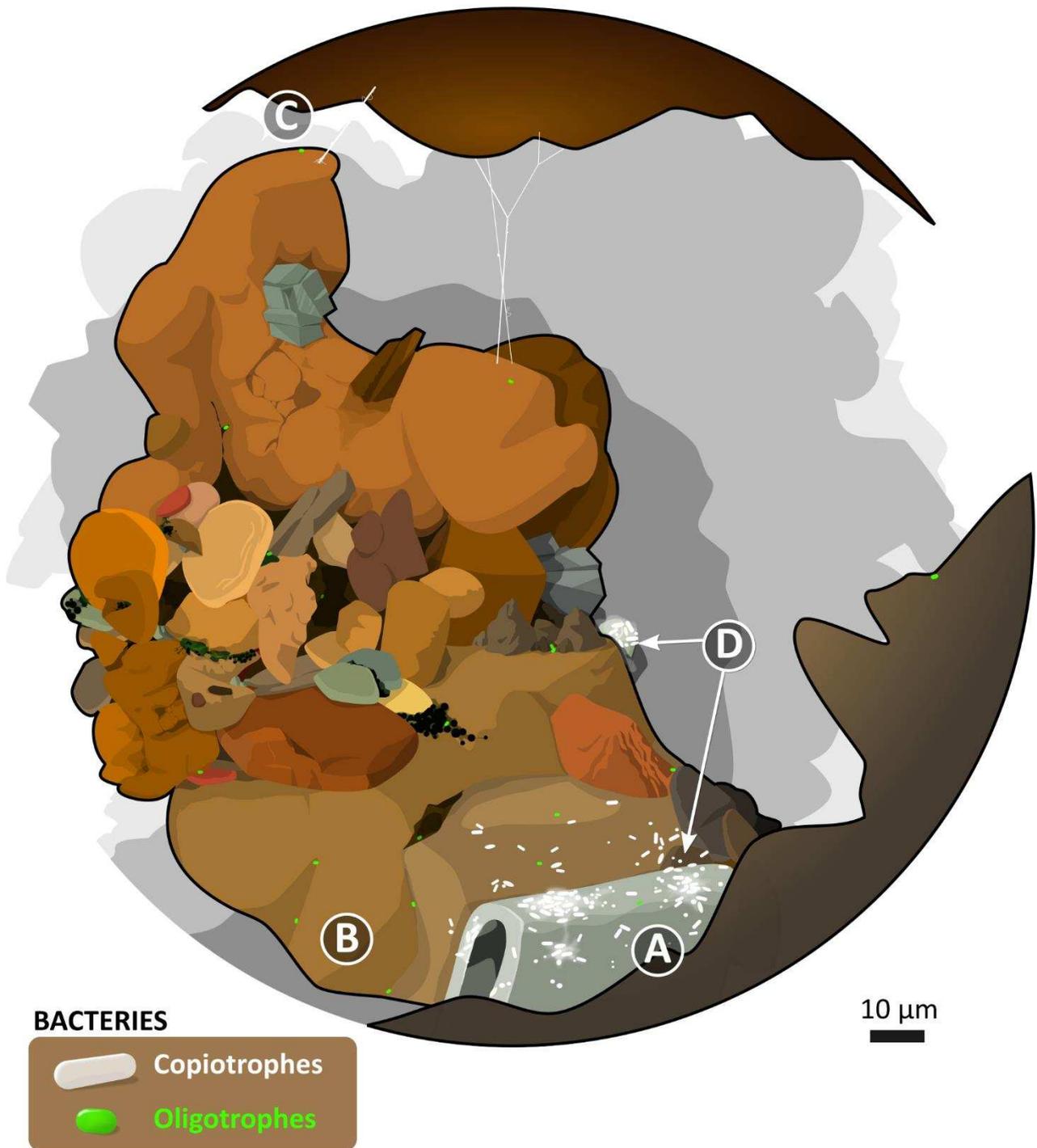


Figure IV.27. Proposition de représentation illustrative du micro-environnement du sol et des stratégies bactériennes. L'eau n'est pas représentée par soucis de lisibilité. De même, parmi

l'immense diversité des organismes vivants habitant les sols, seules les bactéries sont représentées ici.

(A) – Les bactéries copiotrophes à faible efficacité maximale d'absorption (représentées en blanc) ont tendance à se développer dans les zones très riches en substrats, comme la surface des particules de matière organiques. Elles peuvent s'associer en biofilms, ce qui a pour effet de réduire à la fois leur mobilité et celle du substrat, leur garantissant une colocalisation optimale avec les hautes concentrations en substrat. Du fait de la forte concentration en substrat et de sa faible diffusivité au sein du biofilm, les bactéries copiotrophes n'ont pas besoin d'une forte efficacité d'absorption pour pouvoir dégrader une fraction significative du substrat et proliférer. Leur faible efficacité d'absorption leur permet par ailleurs de pouvoir former des populations denses sans être en compétition pour le substrat.

(B) – Au contraire, les bactéries oligotrophes à forte efficacité maximale d'absorption (représentées en vert) ont tendance à se développer relativement loin des zones de hautes concentrations en substrat. Leur forte efficacité d'absorption leur permet de pouvoir dégrader une fraction significative du substrat même lorsque ce dernier est fortement dilué. Il en découle que leur activité est principalement limitée non pas par la dilution du substrat mais par l'épuisement local du substrat, car la concentration en substrat qu'elles perçoivent est significativement réduite par la compétition entre bactéries voisines. Ces bactéries oligotrophes adoptent ainsi préférentiellement un comportement planctonique qui leur permet d'être facilement transportées afin d'échapper à la compétition locale entre elles. Malgré leur espacement supérieur à 10 μm et l'amplitude limitée du gradient de substrat engendrée individuellement par chacune d'entre elles, les bactéries oligotrophes présentes au niveau du repère (B) sont moins actives que celle isolée tout en haut de la figure (C), car elles doivent se « partager » la même ressource. La bactérie isolée en haut de la figure (C), malgré son éloignement avec la source du substrat dissout, percevra au final une concentration en substrat plus grande. Les oligotrophes ainsi dispersées dans le volume du sol peuvent totaliser une minéralisation équivalente à celle qui a lieu au niveau de la particule de matière organique.

(D) – Les concentrations plus élevées de substrat dissout ont tendance à favoriser la dispersion des bactéries.

La relation conjecturée et développée au fil de ce chapitre entre la mobilité du substrat, la mobilité des bactéries et leur caractère copiotrophe ou oligotrophe (section III.1.2-4.3, section IV.2.3) mérite d'être approfondie, notamment à plus petite échelle. Ce type de questionnement s'inscrit dans le corpus encore naissant de la biogéographie microbienne à l'échelle du pore initiée depuis une dizaine d'années (Ruamps et al., 2011; Tecon and Or, 2017; Kravchenko et al., 2019b).

On ne voit que ce que l'on est prêt à chercher. On ne cherche que ce que l'on est prêt à croire.

Toute réalité, qu'elle soit scientifique ou sociale, commence d'abord par un imaginaire.

V Perspectives

Ce dernier chapitre s'attache à poser les prémices de futurs questionnements et de futures utilisations des résultats et des relations déterminés dans les chapitres précédents. La première section se concentre sur les verrous actuels à la compréhension du cycle du carbone organique du sol. La deuxième section propose des cas d'application du modèle développé dans cette thèse. La troisième section replace la relation entre compétition bactérienne et dilution du substrat dans le contexte général du sol et de la complexité qui s'y rattache.

V.1. Relations entre l'impact de la densité bactérienne et certains phénomènes clés dans les sols

Au sein de la problématique du devenir du carbone organique dans les sols, il existe un certain nombre de phénomènes clés, qui jouent un rôle significatif dans la dynamique du carbone organique de la plupart des sols, mais qui demeurent encore partiellement inexpliqués (Baveye et al., 2018). Une grande attention est apportée à ces questions pour lever les controverses existantes, pour valider les hypothèses identifiées, mais aussi pour en formuler de nouvelles. Le paradoxe du découplage entre la minéralisation globale du sol et la taille de la population microbienne, mentionné dans la section III.1.2-4.1.2, fait partie de ces quelques phénomènes clés. Le *priming effect* (effet d'amorçage) et l'effet Birch en sont deux autres. La limitation de la minéralisation par la compétition locale due aux déséquilibres spatiaux de densité bactérienne n'a pas encore été considérée dans l'étude des phénomènes clés cités ci-dessus, et pourrait éventuellement soulever de nouvelles pistes de compréhension.

V.1.1. Effet d'amorçage (*priming effect*)

Utilisé pour la première fois par Bingeman et al. (1953), le terme de « *priming effect* » désigne l'accélération (*priming effect* positif) ou le ralentissement (*priming effect* négatif) de la minéralisation du carbone organique déjà présent dans le sol (qualifié de « carbone natif ») provoqués par l'ajout de carbone ou d'azote organiques exogènes (parfois qualifiés de « frais »). Le *priming effect* est un processus ubiquitaire qui a été observé dans tous types de sol (Perveen et al., 2019). Par rapport aux enjeux identifiés dans la section I.1 sur le stockage du carbone dans le sol, ce phénomène revêt une grande importance puisque le *priming effect* positif réduit l'incorporation dans le sol des amendements de matière organique censés augmenter la teneur en carbone des sols, et peut même aller jusqu'à favoriser la minéralisation du stock de carbone du sol déjà présent (Nyborg et al., 1995; Fontaine et al., 2004).

De nombreux mécanismes ont été proposés pour expliquer ce phénomène. Bien qu'il soit probable que le *priming effect* résulte d'une succession de processus (Blagodatskaya and Kuzyakov, 2008), il est souvent suggéré que la principale cause soit une augmentation de l'activité microbienne ou du nombre de microorganismes dans le sol (Kuzyakov et al., 2000). Fontaine et al. (2003) soulignent que le *priming effect* ne se résume pas à une simple multiplication de l'ensemble des bactéries du sol engendrée par un apport d'énergie, mais à la favorisation ciblée des bactéries dégradant lentement la matière organique récalcitrante du sol, c'est-à-dire des bactéries à stratégie *K* (voir Encart 1).

Au regard des résultats de cette thèse, il apparaît intéressant de se demander si un mécanisme faisant intervenir la dispersion spatiale des dégradeurs pourrait également jouer un rôle dans le *priming effect*. En effet, il n'est pas aberrant d'imaginer que l'apport de matière organique exogène puisse fournir à des bactéries oligotrophes initialement soumises à une compétition extrême au sein de micro-colonies un apport d'énergie suffisant pour favoriser leur motilité. Les bactéries copiotrophes pourraient voir également leur dispersion favorisée par l'apport d'énergie, mais ces bactéries ne sont pas limitées initialement par une telle compétition locale intra-spécifique et leur dispersion ne favorise pas leur activité, au contraire (voir section III.1.2-4.1.1). L'apport de matière organique exogène entraînerait ainsi un effet bénéfique spécifiquement sur les populations oligotrophes, également assimilables aux populations à stratégie *K* (Tecon and Or, 2017), et accélérerait la décomposition du carbone natif. En d'autres termes, la réduction de la compétition locale entre bactéries à stratégie *K*, grâce à leur dispersion active, permettrait de les rendre plus compétitives par rapport aux bactéries à stratégie *r*, comme formulé par Fontaine et al. (2003).

V.1.2. Effect Birch

Introduit pour la première fois par Birch (1964), le terme de « *Birch effect* » désigne l'accélération de la décomposition de la matière organique du sol causée par des épisodes de séchage-réhumidification intermittents (Jarvis et al., 2007). Ce phénomène est

principalement expliqué par le fait que, lors d'un épisode de sécheresse et également au moment de la réhumidification, une partie de la matière colloïdale du sol se dégrade et libère des composés organiques solubles qui deviennent accessibles aux bactéries dès lors que le sol est mouillé à nouveau (Unger et al., 2010). Notamment, la réhumidification brutale du sol entraîne par choc osmotique la lyse cellulaire d'une partie de la biomasse bactérienne, remettant en solution de la matière organique précédemment immobilisée (Kieft et al., 1987).

Les résultats expérimentaux de Pinheiro et al. (2018) montrent un comportement qui pourrait être similaire à l'effet Birch : l'arrosage intermittent entraîne une accélération de la vitesse globale de minéralisation par rapport aux conditions sans arrosage (Pinheiro et al., 2015). Ce phénomène est expliqué par la dispersion des bactéries oligotrophes du sol qui permet de lever la compétition spatiale entre ces bactéries et de révéler leur plein potentiel de dégradation (section III.1). Il apparaît intéressant de se demander si un tel mécanisme pourrait être à l'œuvre dans le phénomène plus général d'effet Birch.

Schimmel (2018) précise justement que la question de savoir si l'effet Birch est lié à la croissance des bactéries ou aux processus physiques n'est pas encore tranchée. Xu et al. (2004) soulignent que la rapidité de l'effet Birch indique que, même dans les conditions sèches qui précèdent l'épisode pluvieux, une partie des bactéries est prête à être active et peut ainsi métaboliser les composés organiques dès la réhumidification. Cette observation rejoint les résultats de la section III.1 où les bactéries oligotrophes possèdent un fort potentiel d'activité et une forte efficacité d'absorption du substrat qui sont simplement momentanément bridés par la compétition pour le substrat entre bactéries trop proches. La dispersion des bactéries oligotrophes, très compétitives, aurait pour effet de convertir la compétition intra-spécifique précédente en compétition inter-spécifique. Cette hypothèse est en accord avec la diminution de la diversité bactérienne observée lors de l'effet Birch par Engelhardt et al. (2018) et expliquée par une plus grande compétition inter-spécifique due à la restauration de la connectivité hydrique.

V.1.3. Vitesse d'écoulement et dénitrification dans les bassins versants

La dispersion de particules mobiles (telles que des bactéries) dans un milieu poreux (tel que le sol ou le sous-sol) dépend de la fréquence et de la vitesse des écoulements. Au-delà du sol, on peut tout-à-fait envisager que la dispersion des bactéries joue également un rôle important dans les milieux poreux saturés en eau, comme les aquifères. On peut alors se poser la question du rôle des écoulements souterrains sur la compétition bactérienne locale, et au final sur la dégradation de solutés. Une problématique majeure qui se rattache à cette question est celle des processus microbiens de dénitrification qui ont lieu dans les aquifères. Les dernières étapes de la minéralisation de l'azote organique (dénitrification) ont lieu dans des milieux saturés en eau (**Figure V.1**) au sein des nappes phréatiques.

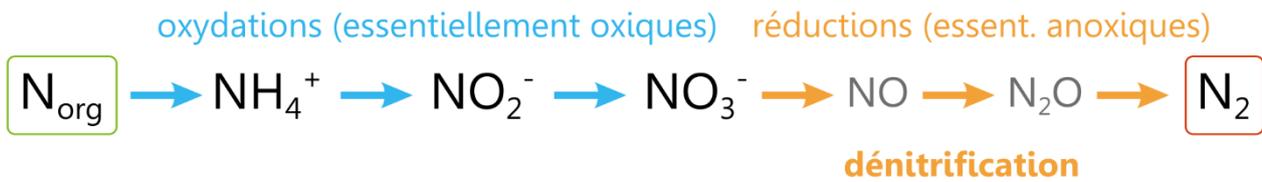


Figure V.1. Etapes de la minéralisation de l'azote organique et de la dénitrification. La dénitrification (en orange) a lieu en absence d'oxygène, c'est-à-dire dans des milieux saturés en eau.

Ces milieux saturés sont potentiellement soumis à un écoulement hydrique, et la vitesse de dispersion hydrodynamique des bactéries dépend alors de la vitesse d'écoulement (**Figure V.2**), sur laquelle influent de nombreux facteurs comme la pente de l'aquifère ou la topographie du bassin versant (Marçais, 2018). Il est intéressant de se demander si les zones où les vitesses d'écoulement sont les plus fortes montrent des taux de minéralisation plus faibles ou plus élevés, respectivement dus à des temps de résidence plus courts ou au contraire à une meilleure dispersion des bactéries oligotrophes engendrant une compétition locale moindre. Ce questionnement s'inspire du projet « *Microbial Catchment* » de l'équipe RiverLy (**Figure V.3**) visant à comprendre le rôle de l'agencement et de la géométrie des différents versants d'un bassin-versant sur la dénitrification.

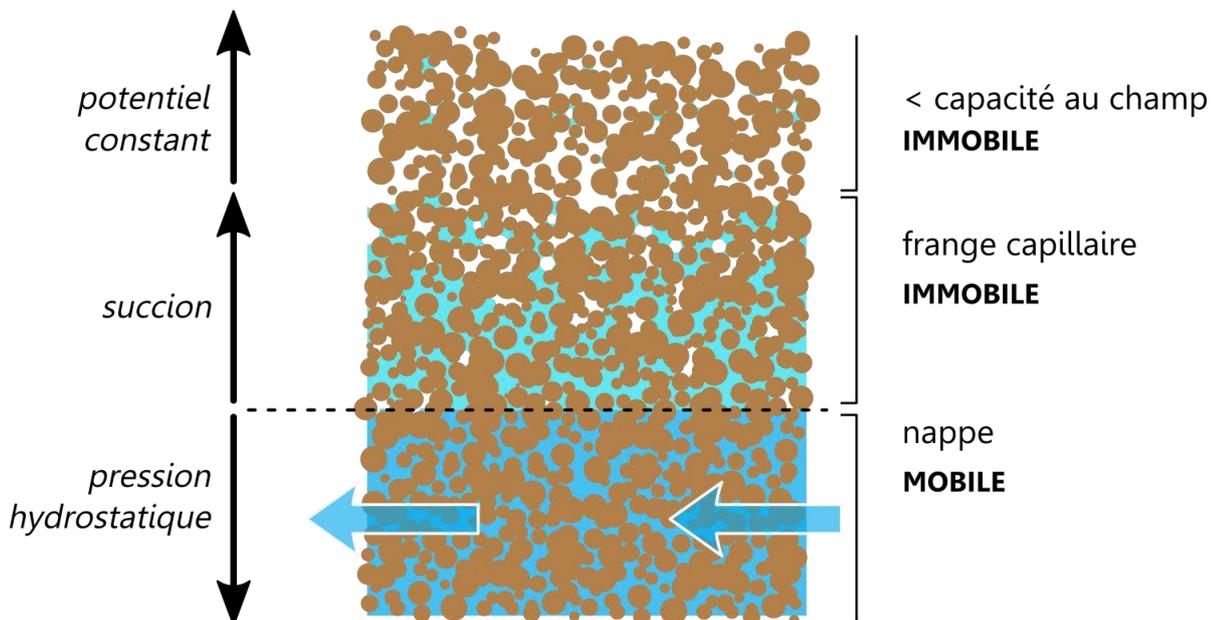


Figure V.2. Représentation des différentes strates au sein du sol. Seule la partie saturée (nappe) est réellement soumise aux écoulements souterrains.

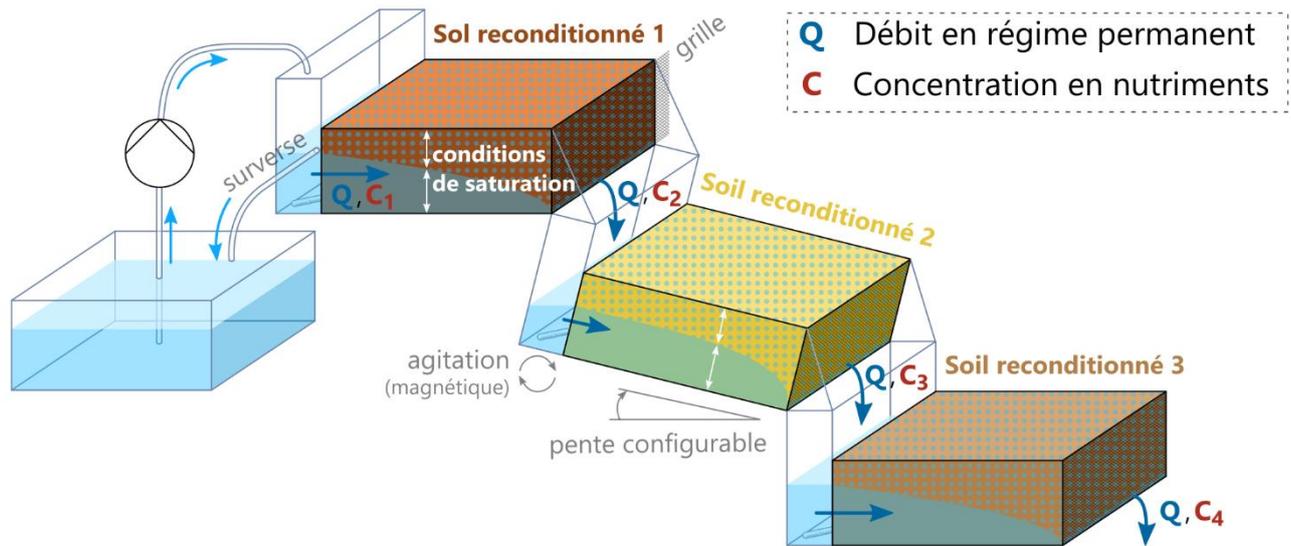


Figure V.3. Aperçu conceptuel des mésocosmes du projet « *Microbial Catchment* ». Le dispositif vise à pouvoir contrôler l'agencement et la pente des différents caissons mimant les différents versants du bassin-versant, et ainsi les écoulements.

Points clés

► La limitation de l'activité bactérienne par la densité offre un nouvel angle d'étude de certains phénomènes clés inexpliqués, tels que le *priming effect* ou le *Birch effect*, qui constituent encore aujourd'hui des verrous à la compréhension du cycle du carbone organique du sol.

V.2. Application du modèle de transport réactif à l'étude d'autres problématiques

Le modèle développé à la fois au cours de la thèse de Babey (2016) et de la présente thèse regroupe un large éventail de fonctionnalités, qui lui permettent de pouvoir être appliqué à diverses problématiques mêlant processus de transport et processus bactériens. En l'état actuel, le prérequis fondamental du modèle est son caractère mécanistique, restreignant son application à des problématiques déterministes qui n'ont pas besoin de faire appel à des processus stochastiques. En particulier, le modèle est applicable aux cinétiques microbiennes qui peuvent être modélisées par des lois populationnelles, et aux processus de transport qui peuvent être modélisés par des lois déterministes. Sous cette condition, le modèle couvre une large gamme d'échelles et de situations, et peut être appliqué à des géométries complexes et à des milieux aux propriétés hétérogènes, incluant par exemple des zones source et des zones puits ou des coefficients de diffusion effectifs variables dans l'espace, et hébergeant des communautés mixtes de plusieurs populations bactériennes dégradant plusieurs substrats, avec différentes modalités de transport, de croissance, et de sorption. Deux exemples sont détaillés dans cette section.

V.2.1. Application à l'intermittence temporelle des apports de substrat

On peut remarquer que l'hétérogénéité spatiale des concentrations en substrat dans le système étudié dans cette thèse contrôle également la dynamique temporelle de l'apport de substrat aux bactéries. En effet, dans l'expérience colocalisée avec percolation, la colocalisation initiale des bactéries et du substrat dans un cube résulte en une exposition des bactéries au substrat élevée mais transitoire, en particulier si les bactéries restent dans leur cube initial. Au contraire, le reste de la colonne de sol est caractérisé par des concentrations en substrat beaucoup plus diluées mais également beaucoup plus stables car, même lorsque les bactéries sont dispersées et dégradent significativement le substrat, les vitesses de dégradation locale restent relativement faibles. Avec le modèle de Monod calibré en hydrostatique et percolation, les bactéries avaient une efficacité maximale d'absorption et une vitesse maximale d'absorption élevées, compensées par une densité initiale en bactérie et une vitesse d'accommodation faibles. Dans le cube initial, ces bactéries étaient trop lentes pour tirer profit des hautes concentrations en substrat aux temps courts. Au contraire, lorsque ces bactéries étaient dispersées dans la colonne de sol, leur haute efficacité maximale d'absorption leur permettait de consommer de manière significative le substrat dilué présent, tandis que leur faible densité et vitesse d'accommodation avaient peu d'impact du fait de la pérennité des concentrations en substrat.

Par analogie, il serait possible d'étendre ces conclusions à des systèmes opposant un apport intermittent de substrat concentré, comme cela peut être le cas par advection, à un apport faible mais constant de substrat dilué, comme cela est le cas par diffusion. On peut postuler que les bactéries rapides seraient mieux adaptées aux apports concentrés intermittents,

tandis que les bactéries lentes mais efficaces seraient mieux adaptées aux apports dilués mais fréquents. De tels résultats pourraient ensuite permettre d'enrichir la compréhension de la biogéographie des bactéries du sol (Tecon and Or, 2017, Kravchenko et al., 2019b) en reliant les types de métabolisme bactériens à la localisation des bactéries dans les pores du sol, les pores larges étant plus propices aux variations rapides de concentrations en substrat soumises à l'advection et les micropores étant plus propices aux concentrations stables soumises à la diffusion.

Dans leur étude, Roller and Schmidt (2015) soulignent notamment cette analogie entre hétérogénéités spatiales et temporelles, en regroupant les faibles concentrations en substrat, les hétérogénéités spatiales et la variabilité temporelle des ressources, au sein de la catégorie des facteurs favorisant les bactéries efficaces en déplaçant l'échelle de compétition depuis l'inter-population vers l'intra-population.

La question de la généralisation des résultats précédents au processus d'apport intermittent de matière organique n'a pas pu être étudiée en détails mais le modèle développé dans cette thèse est pertinent pour étudier ce genre de problématique, et une preuve de concept est présentée ici. Dans ce criblage, le substrat dissout est à la fois apporté et lixivié de manière régulière. Le substrat est apporté à une fréquence donnée. Après chaque apport, le substrat dissout reste présent pendant un jour dans la colonne de sol, où il peut être dégradé et adsorbé. La fraction dissoute restante du substrat est ensuite lixivié, et la colonne de sol reste sans substrat dissout jusqu'à l'apport suivant. Le système alterne ainsi des phases avec et sans substrat. L'intermittence de l'apport de substrat est explorée en faisant varier la durée des phases sans substrat, de 6 h à 24 j. La quantité totale de substrat apportée dans chaque traitement est fixée de manière à être équivalente au final, et correspond à la quantité totale de 2,4-D apportée dans l'expérience homogène avec percolation. De cette sorte, plus l'apport de substrat est fréquent, plus les concentrations apportées sont faibles. Le système est modélisé de manière homogène spatialement.

Majoritairement, la minéralisation augmente avec la régularité de l'apport en substrat. Cet effet est particulièrement visible pour le jeu de paramètres représentant les oligotrophes « modèles » (**Figure V.4**). La minéralisation finale augmente sensiblement avec la fréquence des apports de substrat. La vitesse de dégradation d'un apport de substrat par la population bactérienne est limitée par la concentration en substrat mais aussi par le nombre de dégradeurs bactériens. Sur la durée relativement longue des expériences (24 j) et avec le jeu de paramètres biologiques représenté ici (bactéries efficaces aux faibles concentrations en substrat), il apparaît que la minéralisation est principalement limitée par le nombre de bactéries plutôt que par la concentration en substrat. L'allongement de la durée de présence du substrat dans le système, au détriment de sa concentration, laisse le temps à la population bactérienne d'atteindre une taille significativement plus élevée que lorsque les apports de substrat sont peu fréquents, et augmente ainsi graduellement la vitesse de minéralisation.

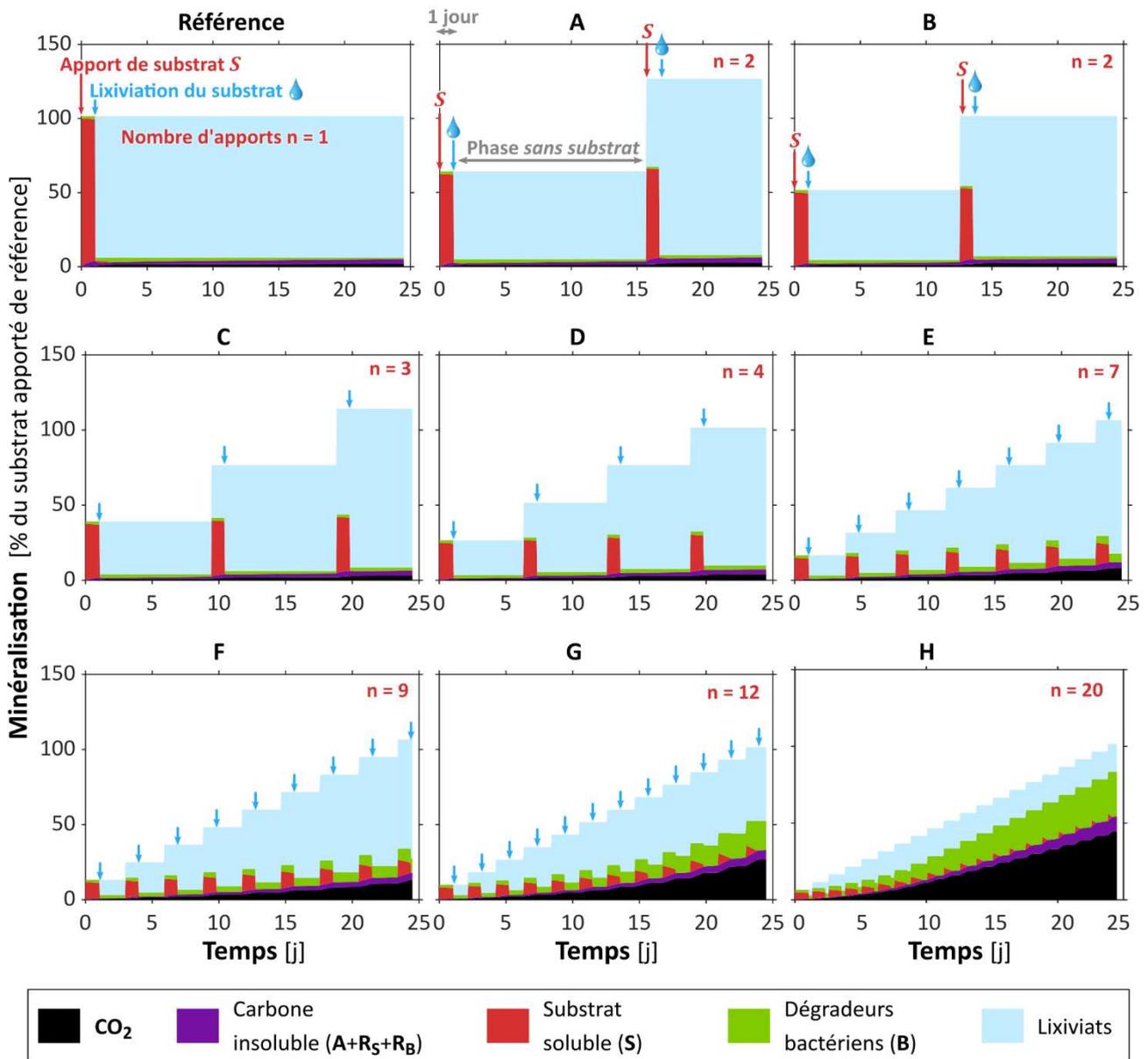


Figure V.4. Bilans de masse de carbone totale suivant différents degrés d'intermittence de l'apport en substrat, pour le jeu de paramètres biologiques des oligotrophes modèles. La minéralisation finale est évaluée par la hauteur de l'aire sous la courbe noire au jour 25. La hauteur de l'ensemble des courbes empilées indique la quantité totale de ¹⁴C (apporté par le substrat) et de carbone bactérien (initialement présent) présente dans le système, qui est censée être similaire dans l'ensemble des traitements. Les résultats montrent une augmentation de la minéralisation totale avec la fréquence des apports de substrat.

Toutefois, le temps disponible pour l'évolution de la biomasse peut parfois être préjudiciable à la minéralisation. Une autre partie des jeux de paramètres induisent en effet une indépendance, voire une diminution, de la minéralisation avec la régularité de l'apport en substrat, comme l'illustre la **Figure V.5** montrant les résultats obtenus pour un jeu de paramètres biologiques, correspondant à une relation de Monod de type pseudo-proportionnelle. La minéralisation diminue avec la fréquence des apports de

substrat. Le traitement le plus concentré et le plus discontinu (**Figure V.5**, « Référence ») conduit à la performance de minéralisation la plus élevée. L'interprétation des résultats nécessite encore de plus amples analyses. En première évaluation cependant, la mortalité des bactéries semble jouer un rôle majeur. En effet, bien que la proportion de substrat dégradé par une bactérie reste la même quelle que soit la concentration en substrat, du fait de la proportionnalité de la relation de Monod ici, le nombre de dégradeurs bactériens évolue sensiblement au cours du temps, du fait de la croissance et de la mortalité. Le fait que la croissance des bactéries soit brusque ou étalée dans le temps ne semble pas impacter la minéralisation finale. À l'inverse, la mortalité élimine continuellement des bactéries. Ainsi, la dégradation des apports de substrat tardifs mobilise une quantité moindre de bactérie par rapport à la dégradation des apports de substrat précoces, et est donc plus lente. Cela est visible par exemple sur le graphique **A**, où la dégradation du deuxième apport de substrat est presque 50% plus lente que celle du premier apport, du fait du nombre important de bactéries « perdues » par la mortalité. Dans ce système, la dégradation précoce est favorisée, quelles que soit la vitesse maximale d'absorption des bactéries, leur efficacité maximale d'absorption ou leur densité initiale. La suppression de la mortalité fait disparaître l'impact négatif de la fréquence des apports et induit une minéralisation finale indépendante de la fréquence des apports de substrat.

Les résultats sur l'ensemble du criblage semblent suggérer une interaction entre l'impact de l'intermittence et le caractère proportionnel ou indépendant de la relation de Monod entre la vitesse de croissance μ et la concentration en substrat S , mais des analyses plus approfondies restent nécessaires. Alternativement, la proportion initiale de bactéries par rapport au substrat détermine l'importance que va jouer la mortalité et la croissance. Dans une population initialement beaucoup plus nombreuse que la quantité de substrat apportée, comme c'est le cas sur la **Figure V.5**, la dynamique de population résultera principalement de la mortalité plutôt que de la croissance. La minéralisation sera donc avantagée aux temps courts.

Globalement, l'impact positif de la fréquence d'apport du substrat est plus marqué que l'impact négatif, indiquant que le design expérimental développé ici laisse peu apparaître l'impact négatif de la lenteur des apports de substrat.

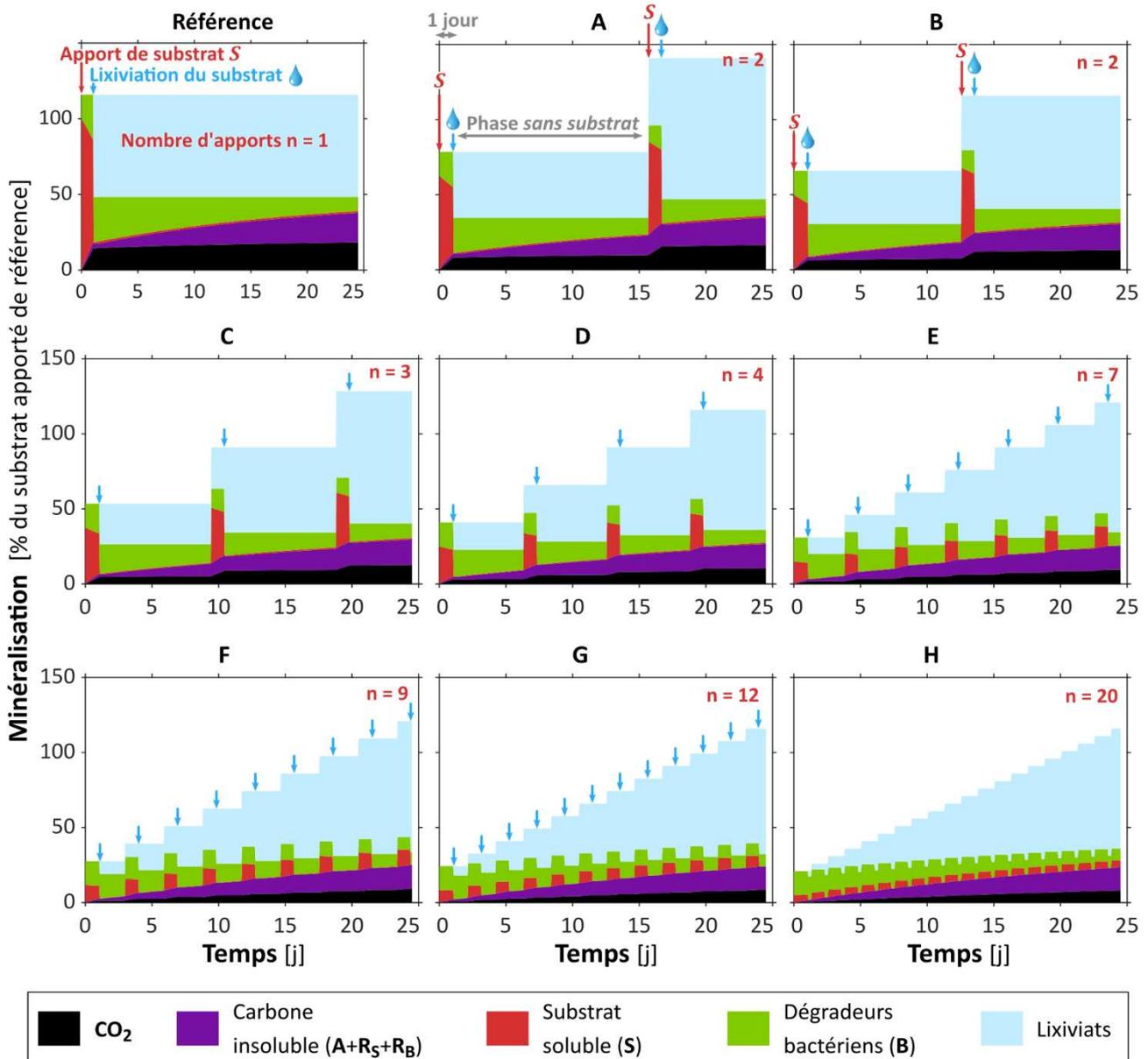


Figure V.5. Bilans de masse de carbone totale suivant différents degrés d'intermittence de l'apport de substrat. Le jeu de paramètres biologiques représentés correspond à une relation de Monod de type proportionnelle à la concentration en substrat, ainsi qu'une absence de retard d'accommodation. Les résultats montrent une diminution de la minéralisation totale avec l'augmentation de la fréquence des apports de substrat. Pour les légendes, se reporter à la Figure V.4 précédente.

V.2.2. Géométries réalistes des films d'eau

Dans cette thèse, les modèles ont été appliqués à des systèmes homogènes. Il existe cependant plusieurs modèles spatiaux capables de prédire la géométrie complexe de la fraction aqueuse au sein d'une géométrie réelle de sol issue de scans de micro-tomographie (Pot et al., 2015) (**Figure V.6**). Ces modèles permettent déjà de simuler la dégradation bactérienne de substrats (Vogel et al., 2015). Dans ce même champ d'application, le modèle

utilisé dans cette thèse pourrait également permettre également de simuler des géométries complexes, combiné avec la capacité à effectuer un criblage d'expériences numériques.

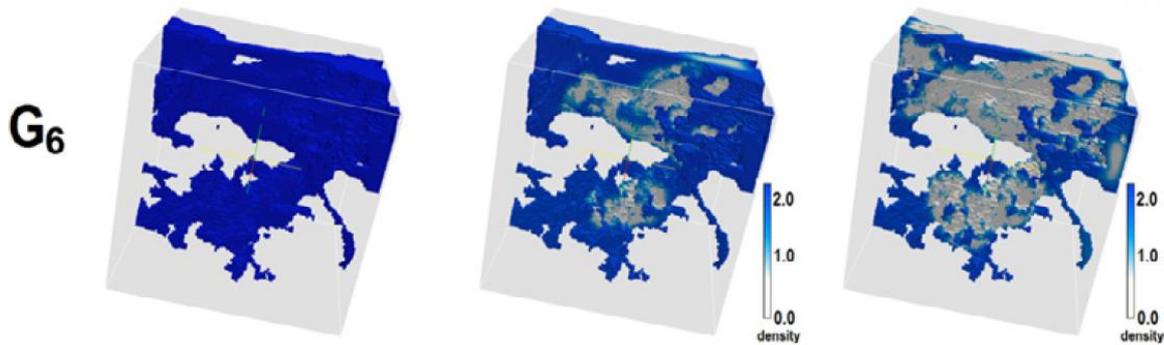


Figure V.6. Géométrie des pores et des répartitions de l'eau et de l'air à différentes teneur en eau. L'eau est représentée en bleu, tandis que le volume poral non saturé est représenté en gris. La géométrie du milieu représenté est issue d'un scan de micro-tomographie d'un échantillon de sol cultivé. Figure issue de Vogel et al. (2015).

Le gradient de concentrations en substrat dû à la diffusion, ainsi que le flux massique diffusif de substrat, dépendent tous deux du temps et de la distance à l'origine du substrat mais aussi de la géométrie du milieu aqueux dès lors que ce dernier est délimité spatialement (*confined*) (Burada et al., 2009). La **Figure IV.24** illustre ce point. Dans le sol, le milieu aqueux est délimité par les interfaces sol-eau et eau-air et suit des géométries complexes qui font varier le coefficient de diffusion effectif, ce dernier diminuant avec la taille des pores (Lancon et al., 2002). Par rapport à une diffusion homogène, un coefficient de diffusion variable affectera le profil de concentrations et ainsi les flux diffusifs (Crank, 1975). Or, comme cela a été montré dans la section, pour les bactéries avec une forte efficacité maximale d'absorption, la minéralisation est facilement limitée par le flux massique de substrat qui diffuse dans le sens opposé à celui du gradient croissant de bactéries. Il serait intéressant d'étudier si certaines configurations spatiales peuvent favoriser, ou au contraire atténuer, cette compétition locale **Figure V.7**. De tels résultats pourraient servir à affiner la relation entre la taille des pores du sol et l'activité biologique telle que formulée par (Kravchenko et al., 2019b).

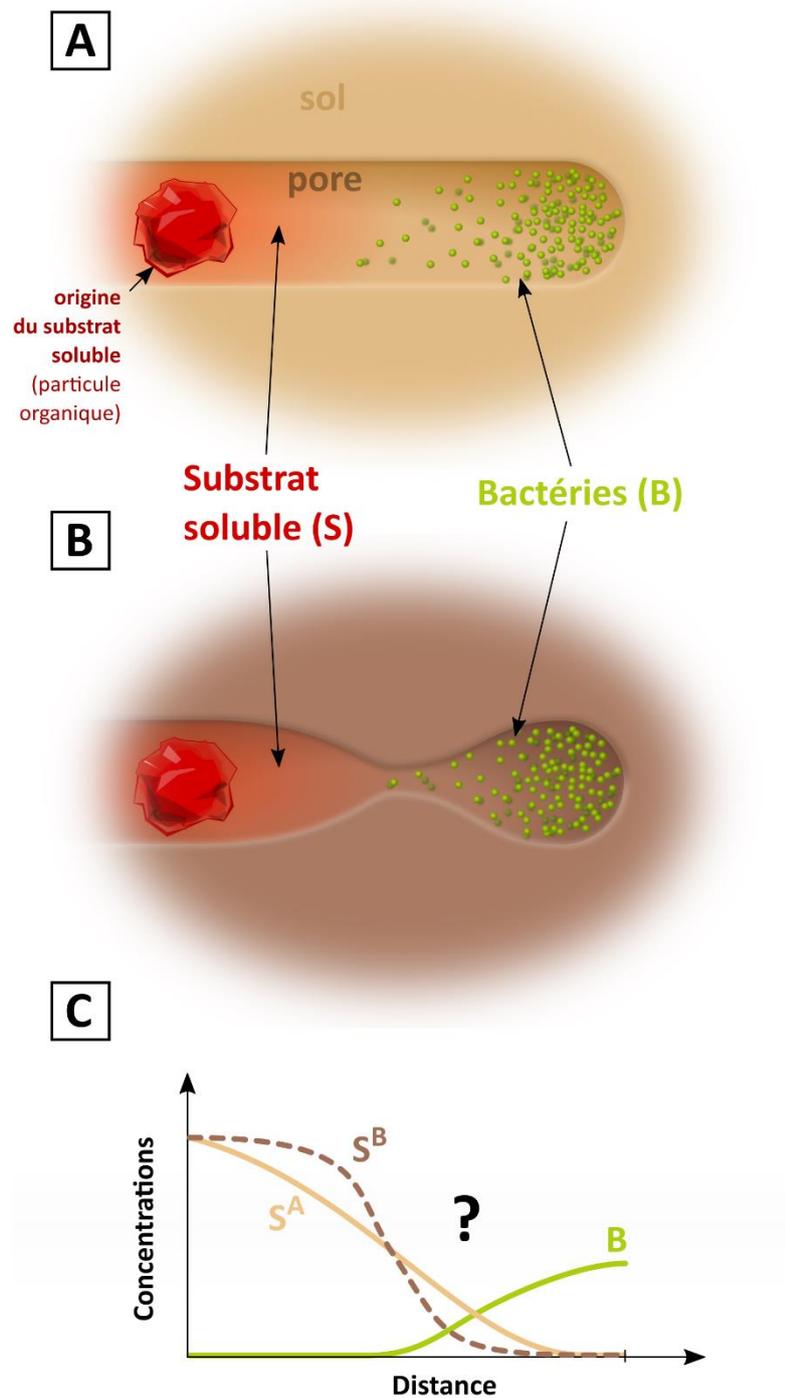


Figure V.7. Scénarios d'impact de la géométrie. Sur les parties (A) et (B), les bactéries sont représentées en vert et le substrat dissout provenant d'une particule organique est indiqué en rouge. Les profils spatiaux de concentrations sont représentés sur la partie (C). Le profil de substrat dans la configuration illustrée en (A) est représenté par la courbe S^A (marron clair), tandis que le profil de substrat de (B) est représenté par la courbe S^B (marron foncé). La constriction du

pore peut potentiellement accentuer ou diminuer les effets de compétition bactérienne locale, en fonction de la position des bactéries.

Points clés

- ▶ Les nombreuses fonctionnalités polyvalentes implémentées peuvent permettre au modèle d'être utilisé pour étudier d'autres problématiques mêlant processus bactériens et processus spatiaux (telles que l'impact de l'intermittence d'épisodes de percolation de substrat sur sa minéralisation, ou l'impact de la géométrie des pores sur la compétition locale entre bactéries).
- ▶ Une étude préliminaire de l'impact de l'intermittence des apports de substrat suggère que l'hétérogénéité temporelle des apports est propice à l'activité des bactéries dont la dynamique de population est plutôt décroissante ou dont l'activité est proportionnelle à la concentration en substrat, et inversement.
- ▶ Le modèle s'adapte aussi bien aux situations théoriques que réalistes.
- ▶ Par rapport aux modèles existants, ce modèle offre l'avantage de pouvoir réaliser facilement des criblages d'expériences numériques.

V.3. Effets cumulatifs ou concurrents des autres processus spatiaux

La compétition due à un déséquilibre spatial de densités au sein d'une population bactérienne est loin d'être le seul processus spatial qui détermine la minéralisation dans les sols. De nombreux autres processus, non étudiés dans cette thèse, existent et jouent un rôle parfois critique qui peut renforcer, contrebalancer ou effacer l'effet de la compétition bactérienne intra-populationnelle mis en évidence dans cette thèse. Les interactions biologiques entre bactéries, notamment les interactions complexes induites lors de la sécrétion d'exoenzymes (compétition, coopération, triche), sont en effet susceptibles de refaçonner le rôle des répartitions et des processus spatiaux (Ebrahimi et al., 2019). La prise en compte plus fine des différentes stratégies métaboliques des bactéries au sein d'un écosystème et de leur arrangement spatial pourrait permettre de relier la composition des communautés microbiennes du sol à son fonctionnement (Pagel et al., 2020), ce qui constitue aujourd'hui un élément manquant majeur en écologie microbienne du sol. De manière plus générale, la prise en compte des organismes autres que bactériens, par exemple les mycètes (*fungi*) ou la mésofaune du sol, amène à des relations spatiales plus complexes, en particulier du fait des interactions entre ces organismes et la répartition spatiale des bactéries (Banitz et al., 2011). La chimiotaxie, à savoir la capacité des bactéries du sol à diriger leur mouvement en fonction de gradients de concentrations de certains solutés, peut s'ajouter aux mécanismes physiques de dispersion des bactéries et ainsi augmenter les vitesses de dispersion (Ebrahimi and Or, 2014). D'autres mécanismes de dispersion peuvent également conduire à déplacer les bactéries sur des distances plus grandes que les distances millimétriques étudiées dans ce travail, engendrant bien souvent une dispersion assez différente d'une dispersion isotrope uniforme (Vos et al., 2013). La divergence entre les mécanismes de dispersion/diffusion du substrat et de dispersion des bactéries pourrait conduire à moduler le rôle de la compétition bactérienne et de la dilution du substrat.

Points clés

► Bien que jouant le rôle dominant dans les expériences de Pinheiro et al., (2015, 2018), le rôle de la densité décrit dans ce travail peut se trouver, dans d'autres situations, altéré, renforcé ou effacé par les nombreux autres processus à l'œuvre dans la minéralisation du carbone organique du sol.

Résumé du chapitre V

Les analyses et les résultats présentés dans cette thèse ont été échafaudés en s'appuyant sur les deux séries d'expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018). Ces expériences ont été réalisées avec des sols reconstitués à partir d'un Luvisol cultivé provenant de région parisienne. Malgré les considérations des deux chapitres précédents en vue de généraliser les résultats, il est évidemment nécessaire de confronter les messages mis en avant tout au long de ce document à d'autres systèmes réels, afin de vérifier la justesse et la pertinence des processus identifiés dans cette thèse. Cette démarche représente également l'opportunité de tenter d'appliquer ces concepts à d'autres problématiques lorsque cela semble judicieux.

Conclusion générale

Au regard des questionnements énoncés dans la section I.3, cette thèse a apporté les réponses suivantes. [1] Le rôle des répartitions spatiales et des processus de transport ne se réduit pas à la dilution des solutés organiques, essentiellement déterminée par la proximité entre les bactéries et la source de matière organique. **La densité bactérienne constitue en effet un contrôle essentiel de la dégradation, qui peut contrebalancer la dilution des solutés.** Ce contrôle est secondaire chez les bactéries à faible efficacité maximale d'absorption, mais dominant chez les bactéries à forte efficacité maximale d'absorption, soulignant le fait que [2] **les répartitions spatiales n'ont de sens qu'à la lumière des métabolismes.** En effet, les bactéries à faible efficacité sont principalement limitées par la dilution du substrat, inadéquate par rapport à leur efficacité, tandis que les bactéries à forte efficacité sont principalement limitées par la compétition entre elles pour le substrat, résultant d'une limitation spatiale liée à la répartition hétérogène des bactéries. L'importance de l'interaction entre l'impact des répartitions spatiales et l'impact des traits biologiques contraste avec le nombre très restreint d'études prenant en compte cette interaction, alors même que les sols abritent une immense diversité microbienne regroupant la plupart des traits écologiques connus.

Cette conceptualisation permet de proposer un cadre unifié pour réconcilier deux visions qui s'opposent parfois pour expliquer la décomposition du carbone du sol, invoquant soit que l'activité des bactéries est limitée par la concentration en solutés à laquelle elles sont exposées, soit qu'elle est limitée par la masse de solutés à laquelle elles sont accés. Cette thèse précise ainsi le fait que l'activité des individus bactériens est fondamentalement limitée par la concentration en solutés, comme en témoigne la relation croissante monotone entre l'activité bactérienne et la concentration de solutés. On peut par ailleurs rajouter dans ce sens que la probabilité pour une bactérie de capturer les solutés s'élève au mieux à 0.1-10% des molécules entrant en collision avec sa membrane, pour les bactéries les plus efficaces du sol. Cette limitation est vraisemblablement la limitation principale lorsque les concentrations en solutés sont suffisamment faibles par rapport à la constante de saturation K_M , et on peut alors arguer que cette limitation est d'ordre métabolique étant donné l'inadéquation de l'efficacité des bactéries aux concentrations en solutés de leur environnement. A l'inverse, on peut parler de limitation de l'activité des bactéries par la compétition intra-populationnelle, dès lors que la forte efficacité d'absorption de ces bactéries est combinée à une densité de population suffisante sur une zone suffisamment grande. Les bactéries ont alors la capacité intrinsèque à se développer en milieu dilué tant que la faible teneur en substrat est due à l'éloignement à la source, mais la compétition des bactéries rajoute une déplétion supplémentaire du substrat face à laquelle les bactéries se retrouvent individuellement limitées. Le seuil de densité de bactéries nécessaire pour induire

une compétition locale significative chez des bactéries efficaces est relativement bas, équivalant à des distances de quelques dizaines de μm entre bactéries voisines, ce qui suggère que cette situation se produit couramment dans les sols.

Ces deux types de limitation de l'activité bactérienne, par la dilution du substrat et par la compétition, peuvent être difficiles à différencier dans un certain nombre de situations. Néanmoins, leur nature fondamentalement différente peut conduire à des effets diamétralement opposés dans d'autres situations. Par exemple, la dispersion des microorganismes du sol provoquée lors de la pluie pourra favoriser significativement l'activité des bactéries de type oligotrophes, c'est-à-dire très efficaces, et défavoriser l'activité des bactéries de type copiotrophes, c'est-à-dire peu efficaces. La multiplication des bactéries pourra quant à elle avoir l'effet inverse. Le fort couplage entre les répartitions spatiales, la dispersion et l'activité spécifique des bactéries interpelle sur la nécessité de prendre en compte et d'intégrer les processus biochimiques et spatiaux lors des prédictions mais aussi lors des mesures.

La classification écologique des bactéries du sol en termes d'oligotrophes et de copiotrophes, bien que sujette aux approximations, offre un cadre de compréhension et de représentation simple, permettant d'illustrer les différentes interactions entre processus dans des cas bien différenciés. Cela permet par exemple de formuler des métriques simplifiées, comme l'hypothèse selon laquelle la décomposition par les oligotrophes du sol peut principalement être prédite par la distance moyenne entre bactéries voisines, tandis que la décomposition par les copiotrophes du sol peut principalement être prédite par la distance moyenne entre les bactéries et la source de substrat.

La régulation par la densité bactérienne chez les oligotrophes provient d'une compétition locale des bactéries entre elles pour le substrat. Cette compétition, rarement étudiée au sein de populations homogènes, peut être significative dans le sol même aux très faibles densités bactériennes, du fait de l'effet cumulatif dû au nombre de bactéries, ainsi que d'une grande efficacité de ces bactéries à séquestrer les molécules de substrat qu'elles rencontrent, **comparativement à la diffusivité du substrat**. Par ailleurs, des bactéries copiotrophes, c'est-à-dire ayant une efficacité maximale d'absorption beaucoup moindre, peuvent quand même se trouver elles aussi en compétition dans les sols lorsqu'elles sont situées dans des biofilms ou des (micro)agglomérats denses en bactéries et où la diffusivité du substrat est limitée. La dégradation bactérienne repose donc à la fois sur la diffusivité du substrat mais également sur la capacité d'agrégation/dispersion des bactéries et sur leur efficacité d'absorption, qui sont deux piliers de l'adaptation des bactéries à leur milieu. Cette compréhension des mécanismes à l'échelle bactérienne apporte des éléments pour conjecturer la répartition spatiale des bactéries et de leurs substrats dissouts dans les sols. Plus généralement, cela conduit à plusieurs hypothèses sur les relations entre les traits métaboliques des bactéries, leur localisation par rapport à leur substrat, le type de substrat qu'elles privilégient et leur mobilité.

Enfin, l'importance du contrôle de la dégradation par la densité bactérienne et sa modulation en fonction des traits métaboliques conduit à [3] conférer un certain nombre d'avantages au **modèle ratio-dépendant de Contois** par rapport au modèle substrat-dépendant de Monod.

L'ensemble des résultats de cette thèse a été obtenu en conservant, du moins en partie, les expériences de Pinheiro et al. (2015, 2018) comme cadre au modèle et aux expériences numériques. Le chapitre IV s'est attaché à généraliser ces résultats à des échelles spatiales et temporelles différentes ainsi qu'à d'autres systèmes. Il reste néanmoins nécessaire de confronter ces généralisations théoriques à des systèmes réels. Ce besoin de validation n'empêche pas de poursuivre les expérimentations numériques, en premier lieu celles qui ont été amorcées durant la thèse et n'ont pu être finies, comme par exemple la généralisation de l'étude du rôle de la diffusivité du substrat à l'ensemble du criblage.

Finalement, ce travail laisse envisager que les interactions entre les processus biologiques et spatiaux, ainsi que l'approche méthodologique de criblage numérique, soient des aspects pertinents qui pourront être réutilisés et approfondis.

*Ils véquirent enfants, et firent
beaucoup d'heureux.*

— Johana Caruso

Bibliographie

- Abbott, A.J., Nelsestuen, G.L., 1988. The collisional limit: an important consideration for membrane-associated enzymes and receptors. *The FASEB Journal* 2, 2858–2866. <https://doi.org/10.1096/fasebj.2.13.2844615>
- Abrams, P.A., 2015. Why ratio dependence is (still) a bad model of predation: Ratio-dependent predation. *Biological Reviews* 90, 794–814. <https://doi.org/10.1111/brv.12134>
- Addiscott, T.M., 2010. Soil mineralization: An emergent process? *Geoderma* 160, 31–35. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2010.03.016>
- Allison, S.D., 2005. Cheaters, diffusion and nutrients constrain decomposition by microbial enzymes in spatially structured environments: Constraints on enzymatic decomposition. *Ecology Letters* 8, 626–635. <https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2005.00756.x>
- Arditi, R., Saiah, H., 1992. Empirical evidence of the role of heterogeneity in ratio-dependent consumption. *Ecology* 73, 1544–1551. <https://doi.org/10.2307/1940007>
- Arias-Estévez, M., López-Periago, E., Martínez-Carballo, E., Simal-Gándara, J., Mejuto, J.-C., García-Río, L., 2008. The mobility and degradation of pesticides in soils and the pollution of groundwater resources. *Agriculture, Ecosystems & Environment* 123, 247–260. <https://doi.org/10.1016/j.agee.2007.07.011>
- Arnaldos, M., Amerlinck, Y., Rehman, U., Maere, T., Van Hoey, S., Naessens, W., Nopens, I., 2015. From the affinity constant to the half-saturation index: Understanding conventional modeling concepts in novel wastewater treatment processes. *Water Research* 70, 458–470. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.11.046>
- Babey, T., 2016. Compartimentation et transfert de contaminants dans les milieux souterrains: interaction entre transport physique, réactivité chimique et activité biologique (These de doctorat). Rennes 1.
- Babey, T., Vieublé Gonod, L., Rapaport, A., Pinheiro, M., Garnier, P., de Dreuzy, J.-R., 2017. Spatiotemporal simulations of 2,4-D pesticide degradation by microorganisms in 3D soil-core experiments. *Ecological Modelling* 344, 48–61. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2016.11.006>
- Badawi, N., Johnsen, A.R., Sørensen, J., Aamand, J., 2013. Centimeter-Scale Spatial Variability in 2-Methyl-4-Chlorophenoxyacetic Acid Mineralization Increases with Depth in Agricultural Soil. *Journal of Environment Quality* 42, 683. <https://doi.org/10.2134/jeq2012.0397>
- Bælum, J., Henriksen, T., Hansen, H.C.B., Jacobsen, C.S., 2006. Degradation of 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid in top- and subsoil is quantitatively linked to the class III

- tfdA gene. *Applied and Environmental Microbiology* 72, 1476–1486. <https://doi.org/10.1128/AEM.72.2.1476-1486.2006>
- Bælum, J., Nicolaisen, M.H., Holben, W.E., Strobel, B.W., Sørensen, J., Jacobsen, C.S., 2008. Direct analysis of tfdA gene expression by indigenous bacteria in phenoxy acid amended agricultural soil. *The ISME Journal* 2, 677–687. <https://doi.org/10.1038/ismej.2008.21>
- Balesdent, J., Chenu, C., Balabane, M., 2000. Relationship of soil organic matter dynamics to physical protection and tillage. *Soil and Tillage Research* 53, 215–230. [https://doi.org/10.1016/S0167-1987\(99\)00107-5](https://doi.org/10.1016/S0167-1987(99)00107-5)
- Balkwill, D.L., Leach, F.R., Wilson, J.T., McNabb, J.F., White, D.C., 1988. Equivalence of microbial biomass measures based on membrane lipid and cell wall components, adenosine triphosphate, and direct counts in subsurface aquifer sediments. *Microbial Ecology* 16, 73–84. <https://doi.org/10.1007/BF02097406>
- Banitz, T., Wick, L.Y., Fetzer, I., Frank, K., Harms, H., Johst, K., 2011. Dispersal networks for enhancing bacterial degradation in heterogeneous environments. *Environmental Pollution* 159, 2781–2788. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.05.008>
- Barnett, S.E., Youngblut, N.D., Koechli, C.N., Buckley, D.H., 2021. Life history strategies explain bacterial activity in the soil carbon cycle. *BioRxiv* 2021.03.19.436178. <https://doi.org/10.1101/2021.03.19.436178>
- Baveye, P.C., Baveye, J., Gowdy, J., 2016. Soil “Ecosystem” Services and Natural Capital: Critical Appraisal of Research on Uncertain Ground. *Frontiers in Environmental Science* 4. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2016.00041>
- Baveye, P.C., Otten, W., Kravchenko, A., Balseiro-Romero, M., Beckers, É., Chalhoub, M., Darnault, C., Eickhorst, T., Garnier, P., Hapca, S., Kiranyaz, S., Monga, O., Mueller, C.W., Nunan, N., Pot, V., Schlüter, S., Schmidt, H., Vogel, H.-J., 2018. Emergent Properties of Microbial Activity in Heterogeneous Soil Microenvironments: Different Research Approaches Are Slowly Converging, Yet Major Challenges Remain. *Frontiers in Microbiology* 9, 1929. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2018.01929>
- Baveye, P.C., 2020. “Soil biofilms”: Misleading description of the spatial distribution of microbial biomass in soils. *Soil Ecology Letters* 2, 2–5. <https://doi.org/10.1007/s42832-020-0024-8>
- Bellamy, P.H., Loveland, P.J., Bradley, R.I., Lark, R.M., Kirk, G.J.D., 2005. Carbon losses from all soils across England and Wales 1978–2003. *Nature* 437, 245–248. <https://doi.org/10.1038/nature04038>
- Beuling, E.E., 2000. Diffusion coefficients of metabolites in active biofilms. *Biotechnology and Bioengineering* 67, 8.
- Bijeljic, B., Blunt, M.J., 2007. Pore-scale modeling of transverse dispersion in porous media: Pore-scale modeling of transverse dispersion. *Water Resources Research* 43. <https://doi.org/10.1029/2006WR005700>

- Bingeman, C.W., Varner, J.E., Martin, W.P., 1953. The Effect of the Addition of Organic Materials on the Decomposition of an Organic Soil. *Soil Science Society of America Journal* 17, 34–38. <https://doi.org/10.2136/sssaj1953.03615995001700010008x>
- Birch, H.F., 1964. Mineralisation of plant nitrogen following alternate wet and dry conditions. *Plant and Soil* 20, 43–49. <https://doi.org/10.1007/BF01378096>
- Blackman, F.F., 1905. Optima and Limiting Factors. *Annals of Botany* 19, 281–296. <https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.aob.a089000>
- Blagodatskaya, E., Kuzyakov, Y., 2008. Mechanisms of real and apparent priming effects and their dependence on soil microbial biomass and community structure: critical review. *Biology and Fertility of Soils* 45, 115–131. <https://doi.org/10.1007/s00374-008-0334-y>
- Blum, W.E.H., 2005. Functions of Soil for Society and the Environment. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology* 4, 75–79. <https://doi.org/10.1007/s11157-005-2236-x>
- Boivin, A., Amellal, S., Schiavon, M., van Genuchten, M.Th., 2005. 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) sorption and degradation dynamics in three agricultural soils. *Environmental Pollution* 138, 92–99. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2005.02.016>
- Bonkowski, M., Griffiths, B., Scrimgeour, C., 2000. Substrate heterogeneity and microfauna in soil organic 'hotspots' as determinants of nitrogen capture and growth of ryegrass. *Applied Soil Ecology* 14, 37–53. [https://doi.org/10.1016/S0929-1393\(99\)00047-5](https://doi.org/10.1016/S0929-1393(99)00047-5)
- Bourguet, D., Guillemaud, T., 2016. The Hidden and External Costs of Pesticide Use, in: Lichtfouse, E. (Ed.), *Sustainable Agriculture Reviews*. Springer International Publishing, Cham, pp. 35–120. https://doi.org/10.1007/978-3-319-26777-7_2
- Breitenbeck, G.A., Yang, H., Dunigan, E.P., 1988. Water-facilitated dispersal of inoculant *Bradyrhizobium japonicum* in soils. *Biology and Fertility of Soils* 7, 58–62. <https://doi.org/10.1007/BF00260733>
- Brunner, G.O., 1971. An unconventional view of the 'closest sphere packings'. *Acta Crystallographica Section A* 27, 388–390. <https://doi.org/10.1107/S0567739471000858>
- Bünemann, E.K., Bongiorno, G., Bai, Z., Creamer, R.E., De Deyn, G., de Goede, R., Fleskens, L., Geissen, V., Kuyper, T.W., Mäder, P., Pulleman, M., Sukkel, W., van Groenigen, J.W., Brussaard, L., 2018. Soil quality – A critical review. *Soil Biology and Biochemistry* 120, 105–125. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.01.030>
- Burada, P.S., Hänggi, P., Marchesoni, F., Schmid, G., Talkner, P., 2009. Diffusion in Confined Geometries. *ChemPhysChem* 10, 45–54. <https://doi.org/10.1002/cphc.200800526>
- Burns, R.G., 1982. Enzyme activity in soil: Location and a possible role in microbial ecology. *Soil Biology and Biochemistry* 14, 423–427. [https://doi.org/10.1016/0038-0717\(82\)90099-2](https://doi.org/10.1016/0038-0717(82)90099-2)

- Button, D.K., 1978. On the theory of control of microbial growth kinetics by limiting nutrient concentrations. *Deep Sea Research* 25, 1163–1177. [https://doi.org/10.1016/0146-6291\(78\)90011-5](https://doi.org/10.1016/0146-6291(78)90011-5)
- Button, D.K., 1983. Differences between the kinetics of nutrient uptake by micro-organisms, growth and enzyme kinetics. *Trends in Biochemical Sciences* 8, 121–124. [https://doi.org/10.1016/0968-0004\(83\)90232-3](https://doi.org/10.1016/0968-0004(83)90232-3)
- Button, D.K., 1991. Biochemical basis for whole-cell uptake kinetics: specific affinity, oligotrophic capacity, and the meaning of the michaelis constant. *Applied and Environmental Microbiology* 57, 2033–2038.
- Button, D.K., 1993. Nutrient-limited microbial growth kinetics: overview and recent advances. *Antonie van Leeuwenhoek* 63, 225–235. <https://doi.org/10.1007/BF00871220>
- Button, D.K., Robertson, B., Gustafson, E., Zhao, X., 2004. Experimental and Theoretical Bases of Specific Affinity, a Cytoarchitecture-Based Formulation of Nutrient Collection Proposed To Supersede the Michaelis-Menten Paradigm of Microbial Kinetics. *Applied and Environmental Microbiology* 70, 5511–5521. <https://doi.org/10.1128/AEM.70.9.5511-5521.2004>
- Carrayrou, J., Mosé, R., Behra, P., 2004. Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology* 68, 239–268. [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(03\)00141-4](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(03)00141-4)
- Carslaw, H.S., Jaeger, J.C., 1959. *Conduction of heat in solids*, 2nd edition. ed. Clarendon Press, Oxford.
- Chakrawal, A., Herrmann, A.M., Koestel, J., Jarsjö, J., Nunan, N., Kätterer, T., Manzoni, S., 2020. Dynamic upscaling of decomposition kinetics for carbon cycling models. *Geoscientific Model Development* 13, 1399–1429. <https://doi.org/10.5194/gmd-13-1399-2020>
- Chandrasekhar, S., 1943. Stochastic problems in physics and astronomy, in: *Reviews of Modern Physics*. p. 89.
- Chenu, C., Stotzky, G., 2002. Interactions between microorganisms and soil particles: an overview, in: *Interactions between Soil Particles and Microorganisms: Impact on the Terrestrial Ecosystem*. John Wiley & Sons, pp. 1–40.
- Chenu, C., Chevallier, T., 2015. Les sols au coeur des effets du changement climatique 27–28.
- Chenu, C., Nunan, N., Vieublé Gonod, L., Garnier, P., Pot, V., Recous, S., 2017. Localisation des matières organiques et des activités microbiennes: conséquences pour le fonctionnement du sol, in: *Les sols et la vie souterraine*. pp. 26–36.
- Cheyns, K., Mertens, J., Diels, J., Smolders, E., Springael, D., 2010. Monod kinetics rather than a first-order degradation model explains atrazine fate in soil mini-columns: Implications for pesticide fate modelling. *Environmental Pollution* 158, 1405–1411. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2009.12.041>

- Cliff, J.B., Bottomley, P.J., Haggerty, R., Myrold, D.D., 2002. Modeling the Effects of Diffusion Limitations on Nitrogen-15 Isotope Dilution Experiments with Soil Aggregates. *Soil Science Society of America Journal* 66, 1868–1877. <https://doi.org/10.2136/sssaj2002.1868>
- Comeau, Y., Greer, C.W., Samson, R., 1993. Role of inoculum preparation and density on the bioremediation of 2,4-D-contaminated soil by bioaugmentation. *Applied Microbiology and Biotechnology* 38. <https://doi.org/10.1007/BF00182810>
- Contois, D.E., 1959. Kinetics of bacterial growth: relationship between population density and specific growth rate of continuous cultures. *Journal of General Microbiology* 21, 40–50. <https://doi.org/10.1099/00221287-21-1-40>
- Crank, J., 1975. *The mathematics of diffusion*, 2d ed. Clarendon Press, Oxford.
- Daily, G.C., 1997. Introduction: what are ecosystem services., in: *Nature's Services: Societal Dependence on Natural Ecosystems*.
- Daugherty, D.D., Karel, S.F., 1994. Degradation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid by *Pseudomonas cepacia* DBOI(pRO101) in a dual-substrate chemostat. *Applied and Environmental Microbiology* 60, 3261–3267.
- Dechesne, A., Or, D., Smets, B.F., 2008. Limited diffusive fluxes of substrate facilitate coexistence of two competing bacterial strains: Substrate diffusion and bacterial competition. *FEMS Microbiology Ecology* 64, 1–8. <https://doi.org/10.1111/j.1574-6941.2008.00446.x>
- Dechesne, A., Owsianiak, M., Bazire, A., Grundmann, G.L., Binning, P.J., Smets, B.F., 2010. Biodegradation in a partially saturated sand matrix: compounding effects of water content, bacterial spatial distribution, and motility. *Environmental Science & Technology* 44, 2386–2392. <https://doi.org/10.1021/es902760y>
- Dechesne, A., Badawi, N., Aamand, J., Smets, B.F., 2014. Fine scale spatial variability of microbial pesticide degradation in soil: scales, controlling factors, and implications. *Frontiers in Microbiology* 5, 667. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2014.00667>
- Desmond-Le Quémener, E., Bouchez, T., 2014. A thermodynamic theory of microbial growth. *The ISME Journal* 8, 1747–1751. <https://doi.org/10.1038/ismej.2014.7>
- Dohi, M., Mougi, A., 2018. A coexistence theory in microbial communities. *Royal Society Open Science* 5, 180476. <https://doi.org/10.1098/rsos.180476>
- Don, R.H., Pemberton, J.M., 1981. Properties of six pesticide degradation plasmids isolated from *Alcaligenes paradoxus* and *Alcaligenes eutrophus*. *J. BACTERIOL.* 145, 6.
- Don, R.H., Weightman, A.J., 1985. Transposon mutagenesis and cloning analysis of the pathways for degradation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid and 3-chlorobenzoate in *Alcaligenes eutrophus* JMP134(pJP4). *Journal of Bacteriology* 161, 85–90.

- Dubus, I.G., Brown, C.D., Beulke, S., 2003. Sources of uncertainty in pesticide fate modelling. *Science of The Total Environment* 317, 53–72. [https://doi.org/10.1016/S0048-9697\(03\)00362-0](https://doi.org/10.1016/S0048-9697(03)00362-0)
- Dungait, J.A.J., Hopkins, D.W., Gregory, A.S., Whitmore, A.P., 2012. Soil organic matter turnover is governed by accessibility not recalcitrance. *Global Change Biology* 18, 1781–1796. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2486.2012.02665.x>
- Ebrahimi, A.N., Or, D., 2014. Microbial dispersal in unsaturated porous media: Characteristics of motile bacterial cell motions in unsaturated angular pore networks. *Water Resources Research* 50, 7406–7429. <https://doi.org/10.1002/2014WR015897>
- Ebrahimi, A., Schwartzman, J., Cordero, O.X., 2019. Cooperation and spatial self-organization determine rate and efficiency of particulate organic matter degradation in marine bacteria. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 201908512. <https://doi.org/10.1073/pnas.1908512116>
- Ebru, S., 2020. Direct observation of anisotropic growth of water films on minerals driven by defects and surface tension. *Science Advances* 10.
- Engelhardt, I.C., Welty, A., Blazewicz, S.J., Bru, D., Rouard, N., Breuil, M.-C., Gessler, A., Galiano, L., Miranda, J.C., Spor, A., Barnard, R.L., 2018. Depth matters: effects of precipitation regime on soil microbial activity upon rewetting of a plant-soil system. *The ISME Journal* 12, 1061–1071. <https://doi.org/10.1038/s41396-018-0079-z>
- Falkowski, P., Scholes, R.J., Boyle, E., Canadell, J., 2000. The global carbon cycle: A test of our knowledge of earth as a system. *Science* 290, 291–296. <https://doi.org/10.1126/science.290.5490.291>
- Falloon, P., Smith, P., 2006. Simulating SOC changes in long-term experiments with RothC and CENTURY: model evaluation for a regional scale application. *Soil Use and Management* 18, 101–111. <https://doi.org/10.1111/j.1475-2743.2002.tb00227.x>
- FAO, ITPS, 2020. Global Soil Organic Carbon Map (GSOC map) - Version 1.5.0.
- Fierer, N., Bradford, M.A., Jackson, R.B., 2007. Toward an ecological classification of soil bacteria. *Ecology* 88, 1354–1364. <https://doi.org/10.1890/05-1839>
- Focht, D.D., Shelton, D.R., 1987. Growth Kinetics of *Pseudomonas alcaligenes* C-O Relative to Inoculation and 3-Chlorobenzoate Metabolism in Soil 53, 4.
- Folse, H.J., Allison, S.D., 2012. Cooperation, Competition, and Coalitions in Enzyme-Producing Microbes: Social Evolution and Nutrient Depolymerization Rates. *Frontiers in Microbiology* 3. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2012.00338>
- Fontaine, S., Mariotti, A., Abbadie, L., 2003. The priming effect of organic matter: a question of microbial competition? *Soil Biology and Biochemistry* 35, 837–843. [https://doi.org/10.1016/S0038-0717\(03\)00123-8](https://doi.org/10.1016/S0038-0717(03)00123-8)

- Fontaine, S., Bardoux, G., Abbadie, L., Mariotti, A., 2004. Carbon input to soil may decrease soil carbon content: Carbon input in soil carbon sequestration. *Ecology Letters* 7, 314–320. <https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2004.00579.x>
- Fontaine, S., Barot, S., 2005. Size and functional diversity of microbe populations control plant persistence and long-term soil carbon accumulation: Modelling long-term SOM dynamics. *Ecology Letters* 8, 1075–1087. <https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2005.00813.x>
- Fontaine, S., Barot, S., Barré, P., Bdioui, N., Mary, B., Rumpel, C., 2007. Stability of organic carbon in deep soil layers controlled by fresh carbon supply. *Nature* 450, 277–280. <https://doi.org/10.1038/nature06275>
- Foster, N., Bhatti, J., 2005. Forest Ecosystems: Nutrient Cycling, in: *Encyclopedia of Soil Science*, Second Edition. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/NOE0849338304.ch145>
- Fournier, J.C., 1980. Enumeration of the soil micro-organisms able to degrade 2,4-D by metabolism or co-metabolism. *Chemosphere* 9, 169–174. [https://doi.org/10.1016/0045-6535\(80\)90089-2](https://doi.org/10.1016/0045-6535(80)90089-2)
- Gause, G.F., 1934. Competitive exclusion principle. Williams & Wilkins.
- Ghanbarian, B., Hunt, A.G., Ewing, R.P., Sahimi, M., 2013. Tortuosity in Porous Media: A Critical Review. *Soil Science Society of America Journal* 77, 1461–1477. <https://doi.org/10.2136/sssaj2012.0435>
- Gleeson, S.K., 1994. Density dependence is better than ratio dependence. *Ecology* 75, 1834–1835. <https://doi.org/10.2307/1939642>
- Gözdereliler, E., Boon, N., Aamand, J., De Roy, K., Granitsiotis, M.S., Albrechtsen, H.J., Sørensen, S.R., 2012. Comparing metabolic functionality, community structure and dynamics of herbicide-degrading communities. *Applied and Environmental Microbiology*.
- Grant, W.D., 2004. Life at low water activity. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences* 359, 1249–1267. <https://doi.org/10.1098/rstb.2004.1502>
- Greer, C.W., Hawari, J., Samson, R., 1990. Influence of environmental factors on 2,4-dichlorophenoxyacetic acid degradation by *Pseudomonas cepacia* isolated from peat. *Archives of Microbiology* 154, 317–322. <https://doi.org/10.1007/BF00276525>
- Haegeman, B., Rapaport, A., 2008. How flocculation can explain coexistence in the chemostat. *Journal of Biological Dynamics* 2, 1–13. <https://doi.org/10.1080/17513750801942537>
- Haldane, J.B.S., 1956. The relation between density regulation and natural selection. *Proceedings of the Royal Society of London. Series B - Biological Sciences* 145, 306–308. <https://doi.org/10.1098/rspb.1956.0039>

- Hales, T.C., 2011. Historical Overview of the Kepler Conjecture, in: Lagarias, J.C. (Ed.), The Kepler Conjecture. Springer New York, New York, NY, pp. 65–82. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1129-1_3
- Hammond, E.C., 1938. Biological effects of population density in lower organisms. The Quarterly Review of Biology 13, 421–438. <http://www.jstor.org/stable/2808555>
- Hansen, Hubbell, S.P., 1980. Single-nutrient microbial competition: qualitative agreement between experimental and theoretically forecast outcomes. Science 207, 1491–1493. <https://doi.org/10.1126/science.6767274>
- Hansen, S.K., Pandey, S., Karra, S., Vesselinov, V.V., 2017. CHROTRAN: A mathematical and computational model for in situ heavy metal remediation in heterogeneous aquifers. ArXiv:1703.01381 [q-Bio].
- Harmand, J., Godon, J.J., 2007. Density-dependent kinetics models for a simple description of complex phenomena in macroscopic mass-balance modeling of bioreactors. Ecological Modelling 200, 393–402. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2006.08.012>
- Harms, H., Bosma, T.N.P., 1997. Mass transfer limitation of microbial growth and pollutant degradation. Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology 18, 97–105. <https://doi.org/10.1038/sj.jim.2900259>
- Healey, F.P., 1980. Slope of the Monod equation as an indicator of advantage in nutrient competition. Microbial Ecology 5, 281–286. <http://www.jstor.org/stable/4250586>
- Helling, C.S., Turner, B.C., 1968. Pesticide mobility: determination by soil thin-layer chromatography. Science 162, 562–563. <https://doi.org/10.1126/science.162.3853.562>
- Herrick, J.E., Wander, M.M., 1998. Relationships between soil organic carbon and soil quality in cropped and rangeland soils: The importance of distribution, composition, and soil biological activity, in: Soil Processes and the Carbon Cycle. pp. 405–425. <https://doi.org/10.1201/9780203739273>
- Holden, P.A., Firestone, M.K., 1997a. Soil microorganisms in soil cleanup: How can we improve our understanding? Journal of Environment Quality 26, 32–40. <https://doi.org/10.2134/jeq1997.00472425002600010006x>
- Holden, P.A., Hunt, J.R., Firestone, M.K., 1997b. Toluene diffusion and reaction in unsaturated Pseudomonas putida biofilms. Biotechnology and Bioengineering 56, 15.
- Hron, P., Jost, D., Bastian, P., Gallert, C., Winter, J., Ippisch, O., 2014. Numerical simulation of growth of Escherichia coli in unsaturated porous media. ArXiv:1407.3743 [q-Bio].
- Hursh, A., Ballantyne, A., Cooper, L., Maneta, M., Kimball, J., Watts, J., 2017. The sensitivity of soil respiration to soil temperature, moisture, and carbon supply at the global scale. Global Change Biology 23, 2090–2103. <https://doi.org/10.1111/gcb.13489>
- Iserles, A., 2009. A first course in the numerical analysis of differential equations, Cambridge University Press. ed.

- Islam, F., Wang, J., Farooq, M.A., Khan, M.S.S., Xu, L., Zhu, J., Zhao, M., Muños, S., Li, Q.X., Zhou, W., 2018. Potential impact of the herbicide 2,4-dichlorophenoxyacetic acid on human and ecosystems. *Environment International* 111, 332–351. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2017.10.020>
- Jackson, R.B., Lajtha, K., Crow, S.E., Hugelius, G., Kramer, M.G., Piñeiro, G., 2017. The Ecology of Soil Carbon: Pools, Vulnerabilities, and Biotic and Abiotic Controls. *Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics* 48, 419–445. <https://doi.org/10.1146/annurev-ecolsys-112414-054234>
- Janzen, H.H., Janzen, D.W., Gregorich, E.G., 2021. The ‘soil health’ metaphor: illuminating or illusory? *Soil Biology and Biochemistry* 108167. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2021.108167>
- Jarvie, D.M., 1991. Total Organic Carbon (TOC) Analysis: Chapter 11: Geochemical methods and exploration 37, 113–118.
- Jarvis, P., Rey, A., Petsikos, C., Wingate, L., Rayment, M., Pereira, J., Banza, J., David, J., Miglietta, F., Borghetti, M., Manca, G., Valentini, R., 2007. Drying and wetting of Mediterranean soils stimulates decomposition and carbon dioxide emission: the “Birch effect.” *Tree Physiology* 27, 929–940. <https://doi.org/10.1093/treephys/27.7.929>
- Jimenez-Martinez, J., Le Borgne, T., Tabuteau, T., Méheust, Y., 2017. Impact of saturation on dispersion and mixing in porous media: Photobleaching pulse injection experiments and shear-enhanced mixing model. *Water Resources Research* 16. <https://doi.org/10.1002/2016WR019849>
- Juarez, S., Nunan, N., Duday, A.-C., Pouteau, V., Chenu, C., 2013. Soil carbon mineralisation responses to alterations of microbial diversity and soil structure. *Biology and Fertility of Soils* 49, 939–948. <https://doi.org/10.1007/s00374-013-0784-8>
- Juyal, A., Otten, W., Falconer, R., Hapca, S., Schmidt, H., Baveye, P.C., Eickhorst, T., 2019. Combination of techniques to quantify the distribution of bacteria in their soil microhabitats at different spatial scales. *Geoderma* 334, 165–174. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.07.031>
- Ka, J.O., Holben, W.E., Tiedje, J.M., 1994. Analysis of competition in soil among 2,4-dichlorophenoxyacetic acid-degrading bacteria. *Applied and Environmental Microbiology* 60, 1121–1128. <https://doi.org/10.1128/AEM.60.4.1121-1128.1994>
- Kamagata, Y., Fulthorpe, R.R., Tamura, K., Takami, H., Forney, L.J., Tiedje, J.M., 1997. Pristine environments harbor a new group of oligotrophic 2,4-dichlorophenoxyacetic acid-degrading bacteria. *Applied and Environmental Microbiology* 63, 2266–2272. <https://doi.org/10.1128/AEM.63.6.2266-2272.1997>
- Kästner, M., Nowak, K.M., Miltner, A., Trapp, S., Schäffer, A., 2014. Classification and Modelling of Nonextractable Residue (NER) Formation of Xenobiotics in Soil – A

- Synthesis. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* 44, 2107–2171. <https://doi.org/10.1080/10643389.2013.828270>
- Kelly, R.H., Parton, W.J., Crocker, G.J., Graced, P.R., Klír, J., Körschens, M., Poulton, P.R., Richter, D.D., 1997. Simulating trends in soil organic carbon in long-term experiments using the century model. *Geoderma* 81, 75–90. [https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(97\)00082-7](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(97)00082-7)
- Kemmitt, S.J., Lanyon, C.V., Waite, I.S., Wen, Q., Addiscott, T.M., Bird, N.R.A., O'Donnell, A.G., Brookes, P.C., 2008. Mineralization of native soil organic matter is not regulated by the size, activity or composition of the soil microbial biomass—a new perspective. *Soil Biology and Biochemistry* 40, 61–73. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2007.06.021>
- Kéroual, B., Fontaine, S., Lallement, A., Revaillet, S., Billard, H., Alvarez, G., Maestre, F., Amblard, C., Lehours, A.-C., 2018. Cellular and non-cellular mineralization of organic carbon in soils with contrasted physicochemical properties. *Soil Biology and Biochemistry* 125, 286–289. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.07.023>
- Kieft, T.L., Soroker, E., Firestone, M.K., 1987. Microbial biomass response to a rapid increase in water potential when dry soil is wetted. *Soil Biology and Biochemistry* 19, 119–126. [https://doi.org/10.1016/0038-0717\(87\)90070-8](https://doi.org/10.1016/0038-0717(87)90070-8)
- Koch, A.L., 1971. The adaptive responses of *Escherichia coli* to a feast and famine existence, in: *Advances in Microbial Physiology*. Elsevier, pp. 147–217. [https://doi.org/10.1016/S0065-2911\(08\)60069-7](https://doi.org/10.1016/S0065-2911(08)60069-7)
- Koch, A.L., Houston Wang, C., 1982. How close to the theoretical diffusion limit do bacterial uptake systems function? *Archives of Microbiology* 131, 36–42. <https://doi.org/10.1007/BF00451496>
- Koch, A.L., 1998. The Monod Model and Its Alternatives, in: Koch, A.L., Robinson, J.A., Milliken, G.A. (Eds.), *Mathematical Modeling in Microbial Ecology*. Springer, Boston.
- Koch, A.L., 2001. Oligotrophs versus copiotrophs. *BioEssays* 23, 657–661. <https://doi.org/10.1002/bies.1091>
- König, S., Vogel, H.-J., Harms, H., Worrlich, A., 2020. Physical, chemical and biological effects on soil bacterial dynamics in microscale models. *Frontiers in Ecology and Evolution* 8, 53. <https://doi.org/10.3389/fevo.2020.00053>
- Kravchenko, A., Guber, A.K., Razavi, B.S., Koestel, J., Blagodatskaya, E.V., Kuzyakov, Y., 2019a. Spatial patterns of extracellular enzymes: Combining X-ray computed microtomography and 2D zymography. *Soil Biology and Biochemistry* 135, 411–419. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2019.06.002>
- Kravchenko, A., Guber, A.K., Razavi, B.S., Koestel, J., Quigley, M.Y., Robertson, G.P., Kuzyakov, Y., 2019b. Microbial spatial footprint as a driver of soil carbon stabilization. *Nature Communications* 10, 3121. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11057-4>

- Kravchenko, A., Otten, W., Garnier, P., Pot, V., Baveye, P.C., 2019c. Soil aggregates as biogeochemical reactors: Not a way forward in the research on soil–atmosphere exchange of greenhouse gases. *Global Change Biology* 25, 2205–2208. <https://doi.org/10.1111/gcb.14640>
- Krichen, E., Harmand, J., Torrijos, M., Godon, J.J., Bernet, N., Rapaport, A., 2018. High biomass density promotes density-dependent microbial growth rate. *Biochemical Engineering Journal* 130, 66–75. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2017.11.017>
- Krüger, U.S., Dechesne, A., Bak, F., Badawi, N., Nybroe, O., Aamand, J., 2019. Bacterial Dispersers along Preferential Flow Paths of a Clay Till Depth Profile. *Applied and Environmental Microbiology* 85, e02658-18, /aem/85/6/AEM.02658-18.atom. <https://doi.org/10.1128/AEM.02658-18>
- Kühn, I., 2007. Incorporating spatial autocorrelation may invert observed patterns. *Diversity & Distributions* 13, 66–69. <https://doi.org/10.1111/j.1472-4642.2006.00293.x>
- Kuzyakov, Y., Friedel, J.K., Stahr, K., 2000. Review of mechanisms and quantification of priming effects. *Soil Biology* 14.
- Kuzyakov, Y., Blagodatskaya, E., 2015. Microbial hotspots and hot moments in soil: Concept & review. *Soil Biology and Biochemistry* 83, 184–199. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2015.01.025>
- Lagneau, V., van der Lee, J., 2010. Operator-splitting-based reactive transport models in strong feedback of porosity change: The contribution of analytical solutions for accuracy validation and estimator improvement. *Journal of Contaminant Hydrology* 112, 118–129. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2009.11.005>
- Lancon, P., Batrouni, G., Lobry, L., Ostrowsky, N., 2002. Brownian walker in a confined geometry leading to a space-dependent diffusion coefficient. *Physica A* 12.
- Langer, U., Böhme, L., Böhme, F., 2004. Classification of soil microorganisms based on growth properties: a critical view of some commonly used terms. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 167, 267–269. <https://doi.org/10.1002/jpln.200421362>
- Launchbaugh, K., Strand, E., n.d. *Rangelands of the World*.
- Lavelle, P., Spain, A.V. (Eds.), 2001. *Soil Organisms*, in: *Soil Ecology*. Springer Netherlands, Dordrecht, pp. 201–356. https://doi.org/10.1007/0-306-48162-6_3
- Law, A.T., Button, D.K., 1977. Multiple-carbon-source-limited growth kinetics of a marine coryneform bacterium. *Journal of Bacteriology* 129, 115–123. <https://doi.org/10.1128/JB.129.1.115-123.1977>
- Lehmann, J., Kleber, M., 2015. The contentious nature of soil organic matter. *Nature* 528, 60–68. <https://doi.org/10.1038/nature16069>
- Lei, J., Guo, X., Zeng, Y., Zhou, J., Gao, Q., Yang, Y., 2021. Temporal changes in global soil respiration since 1987. *Nature Communications* 12, 403. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-20616-z>

- Lerch, T.Z., Chenu, C., Dignac, M.F., Barriuso, E., Mariotti, A., 2017. Biofilm vs. Planktonic Lifestyle: Consequences for Pesticide 2,4-D Metabolism by *Cupriavidus necator* JMP134. *Frontiers in Microbiology* 8, 904. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2017.00904>
- Lewis, S.L., Maslin, M.A., 2015. Defining the Anthropocene. *Nature* 519, 171–180. <https://doi.org/10.1038/nature14258>
- Li, L., Dechesne, A., Madsen, J.S., Nesme, J., Sørensen, S.J., Smets, B.F., 2020. Plasmids persist in a microbial community by providing fitness benefit to multiple phylotypes. *The ISME Journal* 14, 1170–1181. <https://doi.org/10.1038/s41396-020-0596-4>
- Liu, Y., 2007. Overview of some theoretical approaches for derivation of the Monod equation. *Applied Microbiology and Biotechnology* 73, 1241–1250. <https://doi.org/10.1007/s00253-006-0717-7>
- Lobry, J.R., 1991. Ré-évaluation du modèle de croissance de Monod. Effet des antibiotiques sur l'énergie de maintenance (Doctorat). Université Claude Bernard - Lyon I, Lyon.
- Lobry, J.R., Flandrois, J.P., Carret, G., Pave, A., 1992. Monod's bacterial growth model revisited. *Bulletin of Mathematical Biology* 54, 117–122. <https://doi.org/10.1007/BF02458623>
- Lobry, C., Harmand, J., 2006. A new hypothesis to explain the coexistence of n species in the presence of a single resource. *Comptes Rendus Biologies* 329, 40–46. <https://doi.org/10.1016/j.crv.2005.10.004>
- MacArthur, R.H., Wilson, E.O., 1967. *The Theory of Island Biogeography*. Princeton University Press.
- Madsen, E.L., Alexander, M., 1982. Transport of *Rhizobium* and *Pseudomonas* through Soil. *Soil Science Society of America Journal* 46, 557–560. <https://doi.org/10.2136/sssaj1982.03615995004600030023x>
- Maire, V., Alvarez, G., Colombet, J., Comby, A., Despinasse, R., Dubreucq, E., Joly, M., Lehours, A.-C., Perrier, V., Shahzad, T., Fontaine, S., 2013. An unknown oxidative metabolism substantially contributes to soil CO₂ emissions. *Biogeosciences* 10, 1155–1167. <https://doi.org/10.5194/bg-10-1155-2013>
- Manlay, R.J., Feller, C., Swift, M.J., 2007. Historical evolution of soil organic matter concepts and their relationships with the fertility and sustainability of cropping systems. *Agriculture, Ecosystems & Environment* 119, 217–233. <https://doi.org/10.1016/j.agee.2006.07.011>
- Manzoni, S., Porporato, A., 2009. Soil carbon and nitrogen mineralization: Theory and models across scales. *Soil Biology and Biochemistry* 41, 1355–1379. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2009.02.031>
- Marçais, J., 2018. Variabilités des temps de résidence de l'eau et du débit dans les rivières et les nappes phréatiques : implications sur la qualité de l'eau : inférence, modélisation et prédiction des temps de transit de l'eau dans les bassins versants (These de doctorat). Rennes 1.

- Marschmann, G., Tang, J., Brodie, E., 2019. Modeling the size-dependence of microbial functional traits in soil. AGU Fall Meeting Abstracts 51.
- Marshall, K.C., Alexander, M., 1960. Competition between soil bacteria and fusarium. *Plant and Soil* 12, 143–153. <https://doi.org/10.1007/BF01377367>
- Matthies, M., Witt, J., Klasmeier, J., 2008. Determination of soil biodegradation half-lives from simulation testing under aerobic laboratory conditions: A kinetic model approach. *Environmental Pollution* 156, 99–105. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2007.12.040>
- McGowan, C., Fulthorpe, R., Wright, A., Tiedje, J.M., 1998. Evidence for Interspecies Gene Transfer in the Evolution of 2,4-Dichlorophenoxyacetic Acid Degraders. *Applied and Environmental Microbiology* 64, 4089–4092. <https://doi.org/10.1128/AEM.64.10.4089-4092.1998>
- Merini, L.J., Cuadrado, V., Flocco, C.G., Giulietti, A.M., 2007. Dissipation of 2,4-D in soils of the Humid Pampa region, Argentina: A microcosm study. *Chemosphere* 68, 259–265. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2007.01.012>
- Möhring, N., Ingold, K., Kudsk, P., Martin-Laurent, F., Niggli, U., Siegrist, M., Studer, B., Walter, A., Finger, R., 2020. Pathways for advancing pesticide policies. *Nature Food* 1, 535–540. <https://doi.org/10.1038/s43016-020-00141-4>
- Monod, J., 1949. The growth of bacterial cultures. *Annual Review of Microbiology* 3, 371–394. <https://doi.org/https://doi.org/10.1146/annurev.mi.03.100149.002103>
- Moyano, F.E., Manzoni, S., Chenu, C., 2013. Responses of soil heterotrophic respiration to moisture availability: An exploration of processes and models. *Soil Biology and Biochemistry* 59, 72–85. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2013.01.002>
- Murphy, E.M., Ginn, T.R., 2000. Modeling microbial processes in porous media. *Hydrogeology Journal* 8, 142–158. <https://doi.org/10.1007/s100409900043>
- Nelson, M.I., Holder, A., 2009. A fundamental analysis of continuous flow bioreactor models governed by Contois kinetics. II. Reactor cascades. *Chemical Engineering Journal* 149, 406–416. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.01.028>
- Nunan, N., Young, I.M., Crawford, J.W., Ritz, K., 2007. Bacterial interactions at the microscale - Linking habitat to function in soil, in: Franklin, R., Mills, A. (Eds.), *The Spatial Distribution of Microbes in the Environment*. Springer, Dordrecht, pp. 61–85.
- Nunan, N., Schmidt, H., Raynaud, X., 2020. The ecology of heterogeneity: soil bacterial communities and C dynamics. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences* 375, 20190249. <https://doi.org/10.1098/rstb.2019.0249>
- Nyborg, M., Solberg, E.D., Malhi, S.S., Izaurralde, R.C., 1995. Fertilizer N, crop residues, and tillage alter soil C and N content in a decade, in: *Soil Management and Greenhouse Effect*. pp. 93–99.
- Ogata, A., 1970. *Theory of Dispersion in a Granular Medium*. U.S. Government Printing Office.

- Ohta, H., Taniguchi, S., 1988. Growth characteristics of the soil oligotrophic bacterium: *Agromonas oligotrophica* JCM 1494 on diluted nutrient broth. *The Journal of General and Applied Microbiology* 34, 349–353. <https://doi.org/10.2323/jgam.34.349>
- O’Keeffe, M., 2012. Some properties of three-periodic sphere packings. *Struct Chem* 9.
- O’Neill, D.W., Fanning, A.L., Lamb, W.F., Steinberger, J.K., 2018. A good life for all within planetary boundaries. *Nature Sustainability* 1, 88–95. <https://doi.org/10.1038/s41893-018-0021-4>
- Or, D., Smets, B.F., Wraith, J.M., Dechesne, A., Friedman, S.P., 2007. Physical constraints affecting bacterial habitats and activity in unsaturated porous media – a review. *Advances in Water Resources* 30, 1505–1527. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2006.05.025>
- Oren, A., Garrity, G.M., 2014. Then and now: a systematic review of the systematics of prokaryotes in the last 80 years. *Antonie van Leeuwenhoek* 106, 43–56. <https://doi.org/10.1007/s10482-013-0084-1>
- Pagel, H., Kriesche, B., Uksa, M., Poll, C., Kandeler, E., Schmidt, V., Streck, T., 2020. Spatial control of carbon dynamics in soil by microbial decomposer communities. *Frontiers in Environmental Science* 8, 2. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2020.00002>
- Pallud, C., Dechesne, A., Gaudet, J.P., Debouzie, D., Grundmann, G.L., 2004. Modification of spatial distribution of 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid degrader microhabitats during growth in soil columns. *Applied and Environmental Microbiology* 70, 2709–2716. <https://doi.org/10.1128/AEM.70.5.2709-2716.2004>
- Panikov, N.S., 2009. Kinetics, microbial growth. *Encyclopedia of Industrial Biotechnology: Bioprocess, Bioseparation, and Cell Technology* 1–34.
- Parker, L.W., Doxtader, K.G., 1982. Kinetics of Microbial Decomposition of 2,4-D in Soil: Effects of Herbicide Concentration. *Journal of Environmental Quality* 11, 679–684. <https://doi.org/10.2134/jeq1982.00472425001100040024x>
- Patarinska, T., Dochain, D., Agathos, S.N., Ganovski, L., 2000. Modelling of continuous microbial cultivation taking into account the memory effects. *Bioprocess Engineering* 22, 517–527. <https://doi.org/10.1007/s004499900095>
- Perveen, N., Barot, S., Maire, V., Cotrufo, M.F., Shahzad, T., Blagodatskaya, E., Stewart, C.E., Ding, W., Siddiq, M.R., Dimassi, B., Mary, B., Fontaine, S., 2019. Universality of priming effect: An analysis using thirty five soils with contrasted properties sampled from five continents. *Soil Biology and Biochemistry* 134, 162–171. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2019.03.027>
- Peth, S., Chenu, C., Leblond, N., Mordhorst, A., Garnier, P., Nunan, N., Pot, V., Ogurreck, M., Beckmann, F., 2014. Localization of soil organic matter in soil aggregates using synchrotron-based X-ray microtomography. *Soil Biology and Biochemistry* 78, 189–194. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2014.07.024>

- Pfeiffer, T., Schuster, S., Bonhoeffer, S., 2001. Cooperation and Competition in the Evolution of ATP-Producing Pathways 292, 5.
- Pianka, E.R., 1970. On r- and K-Selection. *The American Naturalist* 104, 592–597. <https://doi.org/10.1086/282697>
- Pieper, D.H., Reineke, W., Engesser, K.-H., Knackmuss, H.-J., 1988. Metabolism of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid, 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid and 2-methylphenoxyacetic acid by *Alcaligenes eutrophus* JMP 134. *Archives of Microbiology* 150, 95–102. <https://doi.org/10.1007/BF00409724>
- Pingali, P.L., 2012. Green Revolution: Impacts, limits, and the path ahead. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109, 12302–12308. <https://doi.org/10.1073/pnas.0912953109>
- Pinheiro, M., Garnier, P., Beguet, J., Martin Laurent, F., Vieublé Gonod, L., 2015. The millimetre-scale distribution of 2,4-D and its degraders drives the fate of 2,4-D at the soil core scale. *Soil Biology and Biochemistry* 88, 90–100. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2015.05.008>
- Pinheiro, M., Pagel, H., Poll, C., Ditterich, F., Garnier, P., Streck, T., Kandeler, E., Vieublé Gonod, L., 2018. Water flow drives small scale biogeography of pesticides and bacterial pesticide degraders - A microcosm study using 2,4-D as a model compound. *Soil Biology and Biochemistry* 127, 137–147. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.09.024>
- Plante, A.F., Parton, W.J., 2007. The dynamics of soil organic matter and nutrient cycling, in: *Soil Microbiology, Ecology and Biochemistry*. Elsevier, pp. 433–467. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-047514-1.50020-2>
- Poirier, I., Maréchal, P.-A., Gervais, P., 1997. Effects of the kinetics of water potential variation on bacteria viability. *Journal of Applied Microbiology* 82, 101–106. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2672.1997.tb03303.x>
- Poll, C., Ingwersen, J., Stemmer, M., Gerzabek, M.H., Kandeler, E., 2006. Mechanisms of solute transport affect small-scale abundance and function of soil microorganisms in the detritosphere. *European Journal of Soil Science* 57, 583–595. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.2006.00835.x>
- Portell, X., Pot, V., Garnier, P., Otten, W., Baveye, P.C., 2018. Microscale Heterogeneity of the Spatial Distribution of Organic Matter Can Promote Bacterial Biodiversity in Soils: Insights From Computer Simulations. *Frontiers in Microbiology* 9, 1583. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2018.01583>
- Pot, V., Peth, S., Monga, O., Vogel, L.E., Genty, A., Garnier, P., Vieublé Gonod, L., Ogurreck, M., Beckmann, F., Baveye, P.C., 2015. Three-dimensional distribution of water and air in soil pores: Comparison of two-phase two-relaxation-times lattice-Boltzmann and morphological model outputs with synchrotron X-ray computed tomography data. *Advances in Water Resources* 84, 87–102. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2015.08.006>

- Puget, P., Chenu, C., Balesdent, J., 2000. Dynamics of soil organic matter associated with particle-size fractions of water-stable aggregates: Dynamics of soil organic matter in water-stable aggregates. *European Journal of Soil Science* 51, 595–605. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.2000.00353.x>
- Rawls, W.J., Nemes, A., Pachepsky, Ya., 2004. Effect of soil organic carbon on soil hydraulic properties, in: *Developments in Soil Science*. Elsevier, pp. 95–114. [https://doi.org/10.1016/S0166-2481\(04\)30006-1](https://doi.org/10.1016/S0166-2481(04)30006-1)
- Rapaport, A., 2018. Properties of the chemostat model with aggregated biomass. *European Journal of Applied Mathematics* 29, 972–990. <https://doi.org/10.1017/S0956792518000141>
- Raynaud, X., Leadley, P.W., 2004. Soil characteristics play a key role in modeling nutrient competition in plant communities. *Ecology* 85, 2200–2214. <https://doi.org/10.1890/03-0817>
- Raynaud, X., Nunan, N., 2014. Spatial Ecology of Bacteria at the Microscale in Soil. *PLoS ONE* 9, e87217. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0087217>
- Read, C.P., 1951. The “Crowding Effect” in Tapeworm Infections. *The Journal of Parasitology* 37, 174–178. <https://doi.org/10.2307/3273449>
- Rockström, J., Steffen, W., Noone, K., Persson, Å., Chapin, F.S.I., Lambin, E., Lenton, T.M., Scheffer, M., Folke, C., Schellnhuber, H.J., Nykvist, B., de Wit, C.A., Hughes, T., van der Leeuw, S., Rodhe, H., Sörlin, S., Snyder, P.K., Costanza, R., Svedin, U., Falkenmark, M., Karlberg, L., Corell, R.W., Fabry, V.J., Hansen, J., Walker, B., Liverman, D., Richardson, K., Crutzen, P., Foley, J., 2009. Planetary Boundaries: Exploring the Safe Operating Space for Humanity. *Ecology and Society* 14, art32. <https://doi.org/10.5751/ES-03180-140232>
- Roller, B.R., Schmidt, T.M., 2015. The physiology and ecological implications of efficient growth. *The ISME Journal* 9, 1481–1487. <https://doi.org/10.1038/ismej.2014.235>
- Rosenbom, A.E., Binning, P.J., Aamand, J., Dechesne, A., Smets, B.F., Johnsen, A.R., 2014. Does microbial centimeter-scale heterogeneity impact MCPA degradation in and leaching from a loamy agricultural soil? *Science of The Total Environment* 472, 90–98. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.11.009>
- Ruamps, L.S., Nunan, N., Chenu, C., 2011. Microbial biogeography at the soil pore scale. *Soil Biology and Biochemistry* 43, 280–286. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2010.10.010>
- Rumpel, C., Kögel-Knabner, I., Bruhn, F., 2002. Vertical distribution, age, and chemical composition of organic carbon in two forest soils of different pedogenesis. *Organic Geochemistry* 33, 1131–1142. [https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(02\)00088-8](https://doi.org/10.1016/S0146-6380(02)00088-8)
- Rumpel, C., Amiraslani, F., Chenu, C., Garcia Cardenas, M., Kaonga, M., Koutika, L.-S., Ladha, J., Madari, B., Shirato, Y., Smith, P., Soudi, B., Soussana, J.-F., Whitehead, D., Wollenberg, E., 2020. The 4p1000 initiative: Opportunities, limitations and challenges

- for implementing soil organic carbon sequestration as a sustainable development strategy. *Ambio* 49, 350–360. <https://doi.org/10.1007/s13280-019-01165-2>
- Saxena, S.K., Boersma, L., Lindstrom, F.T., Young, J.L., 1974. The self-diffusion coefficients of ⁴⁵Ca and 2,4-dichlorophenoxyacetic acid. *Soil Science* 117, 14–20. <https://doi.org/10.1097/00010694-197401000-00002>
- Schimel, J.P., 2018. Life in Dry Soils: Effects of Drought on Soil Microbial Communities and Processes. *Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics* 49, 409–432. <https://doi.org/10.1146/annurev-ecolsys-110617-062614>
- Schlesinger, W.H., 1990. Evidence from chronosequence studies for a low carbon-storage potential of soils. *Nature* 348, 232–234. <https://doi.org/10.1038/348232a0>
- Schmidt, S.I., Kreft, J.-U., Mackay, R., Picioreanu, C., Thullner, M., 2018. Elucidating the impact of micro-scale heterogeneous bacterial distribution on biodegradation. *Advances in Water Resources* 116, 67–76. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2018.01.013>
- Schmidt, S.K., Simkins, S., Alexander, M., 1985. Models for the kinetics of biodegradation of organic compounds not supporting growth. *Applied and Environmental Microbiology* 50, 323–331. <https://doi.org/10.1128/AEM.50.2.323-331.1985>
- Semple, K.T., Morriss, A.W.J., Paton, G.I., 2003. Bioavailability of hydrophobic organic contaminants in soils: fundamental concepts and techniques for analysis. *European Journal of Soil Science* 10.
- Serna-Chavez, H.M., Fierer, N., van Bodegom, P.M., 2013. Global drivers and patterns of microbial abundance in soil: Global patterns of soil microbial biomass. *Global Ecology and Biogeography* 22, 1162–1172. <https://doi.org/10.1111/geb.12070>
- Shampine, L.F., Reichelt, M.W., 1997. The MATLAB ODE Suite. *SIAM Journal on Scientific Computing* 18, 1–22. <https://doi.org/10.1137/S1064827594276424>
- Shareef, K., Shaw, G., 2008. Sorption kinetics of 2,4-D and carbaryl in selected agricultural soils of northern Iraq: Application of a dual-rate model. *Chemosphere* 72, 8–15. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2008.02.056>
- Shi, A., Chakrawal, A., Manzoni, S., Fischer, B.M.C., Nunan, N., Herrmann, A.M., 2021. Substrate spatial heterogeneity reduces soil microbial activity. *Soil Biology and Biochemistry* 152, 108068. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2020.108068>
- Sibly, R.M., Hone, J., 2002. Population growth rate and its determinants: an overview. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences* 357, 1153–1170. <https://doi.org/10.1098/rstb.2002.1117>
- Sinton, G.L., Fan, L.T., Erickson, L.E., Lee, S.M., 1986. Biodegradation of 2,4-D and related xenobiotic compounds. *Enzyme and Microbial Technology* 8, 395–403. [https://doi.org/10.1016/0141-0229\(86\)90145-6](https://doi.org/10.1016/0141-0229(86)90145-6)

- Skjemstad, J.O., Spouncer, L.R., Cowie, B., Swift, R.S., 2004. Calibration of the Rothamsted organic carbon turnover model (RothC ver. 26.3), using measurable soil organic carbon pools. *Soil Research* 42, 79. <https://doi.org/10.1071/SR03013>
- Skopp, J., Jawson, M.D., Doran, J.W., 1990. Steady-State Aerobic Microbial Activity as a Function of Soil Water Content. *Soil Science Society of America Journal* 54, 1619–1625. <https://doi.org/10.2136/sssaj1990.03615995005400060018x>
- Smith, P., Smith, J.U., Powlson, D.S., McGill, W.B., Arah, J.R.M., Chertov, O.G., Coleman, K., Franko, U., Frolking, S., Jenkinson, D.S., Jensen, L.S., Kelly, R.H., Klein-Gunnewiek, H., Komarov, A.S., Li, C., Molina, J.A.E., Mueller, T., Parton, W.J., Thornley, J.H.M., Whitmore, A.P., 1997. A comparison of the performance of nine soil organic matter models using datasets from seven long-term experiments. *Geoderma* 81, 153–225. [https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(97\)00087-6](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(97)00087-6)
- Smoluchowski, M. v, 1918. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 92U, 129–168. <https://doi.org/10.1515/zpch-1918-9209>
- Sommer, U., 1986. Nitrate- and silicate-competition among antarctic phytoplankton. *Marine Biology* 91, 345–351. <https://doi.org/10.1007/BF00428628>
- Sorenson, P.T., Quideau, S.A., Rivard, B., Dyck, M., 2020. Distribution mapping of soil profile carbon and nitrogen with laboratory imaging spectroscopy. *Geoderma* 359, 113982. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2019.113982>
- Soulas, G., Lagacherie, B., 2001. Modelling of microbial degradation of pesticides in soils. *Biology and Fertility of Soils* 33, 551–557. <https://doi.org/10.1007/s003740100363>
- Steffen, W., Richardson, K., Rockstrom, J., Cornell, S.E., Fetzer, I., Bennett, E.M., Biggs, R., Carpenter, S.R., de Vries, W., de Wit, C.A., Folke, C., Gerten, D., Heinke, J., Mace, G.M., Persson, L.M., Ramanathan, V., Reyers, B., Sorlin, S., 2015. Planetary boundaries: Guiding human development on a changing planet. *Science* 347, 1259855–1259855. <https://doi.org/10.1126/science.1259855>
- Steffens, M., Rogge, D.M., Mueller, C.W., Höschen, C., Lugmeier, J., Kölbl, A., Kögel-Knabner, I., 2017. Identification of Distinct Functional Microstructural Domains Controlling C Storage in Soil. *Environmental Science & Technology* 51, 12182–12189. <https://doi.org/10.1021/acs.est.7b03715>
- Stephanopoulos, G., Fredrickson, A.G., 1979. Effect of spatial inhomogeneities on the coexistence of competing microbial populations. *Biotechnology and Bioengineering* 21, 1491–1498. <https://doi.org/10.1002/bit.260210817>
- Stockmann, U., Padarian, J., McBratney, A., Minasny, B., de Brogniez, D., Montanarella, L., Hong, S.Y., Rawlins, B.G., Field, D.J., 2015. Global soil organic carbon assessment. *Global Food Security* 6, 9–16. <https://doi.org/10.1016/j.gfs.2015.07.001>
- Tecon, R., Or, D., 2017. Biophysical processes supporting the diversity of microbial life in soil. *FEMS Microbiology Reviews* 41, 599–623. <https://doi.org/10.1093/femsre/fux039>

- Tecon, R., Ebrahimi, A., Kleyer, H., Erev Levi, S., Or, D., 2018. Cell-to-cell bacterial interactions promoted by drier conditions on soil surfaces. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 115, 9791–9796. <https://doi.org/10.1073/pnas.1808274115>
- Tewari, A., Gokhale, A., 2004. Nearest-neighbor distances between particles of finite size in three-dimensional uniform random microstructures. *Materials Science and Engineering A* 385, 332–341. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(04\)00875-5](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(04)00875-5)
- Tiedje, J.M., Duxbury, J.M., Alexander, M., Dawson, J.E., 1969. 2,4-D metabolism: pathway of degradation of chlorocatechols by *Arthrobacter* sp. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 17, 1021–1026. <https://doi.org/10.1021/jf60165a037>
- Tiessen, H., Cuevas, E., Chacon, P., 1994. The role of soil organic matter in sustaining soil fertility. *Nature* 371, 783–785. <https://doi.org/10.1038/371783a0>
- Totsche, K.U., Amelung, W., Gerzabek, M.H., Guggenberger, G., Klumpp, E., Knief, C., Lehndorff, E., Mikutta, R., Peth, S., Pechtel, A., Ray, N., Kögel-Knabner, I., 2018. Microaggregates in soils. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 181, 104–136. <https://doi.org/10.1002/jpln.201600451>
- Treves, D.S., Xia, B., Zhou, J., Tiedje, J.M., 2003. A Two-Species Test of the Hypothesis That Spatial Isolation Influences Microbial Diversity in Soil. *Microbial Ecology* 45, 20–28. <https://doi.org/10.1007/s00248-002-1044-x>
- Tuxen, N., de Liphay, J.R., Albrechtsen, H.-J., Aamand, J., Bjerg, P.L., 2002. Effect of exposure history on microbial herbicide degradation in an aerobic aquifer affected by a point source. *Environmental Science & Technology* 36, 2205–2212. <https://doi.org/10.1021/es0113549>
- Ugalde-Salas, P., Desmond-Le Quéméner, E., Harmand, J., Rapaport, A., Bouchez, T., 2020. Insights from Microbial Transition State Theory on Monod's Affinity Constant. *Scientific Reports* 10, 5323. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-62213-6>
- Unger, S., Máguas, C., Pereira, J.S., David, T.S., Werner, C., 2010. The influence of precipitation pulses on soil respiration – Assessing the “Birch effect” by stable carbon isotopes. *Soil Biology and Biochemistry* 42, 1800–1810. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2010.06.019>
- Vavilin, V.A., Rytov, S.V., Lokshina, L.Ya., 1996. A description of hydrolysis kinetics in anaerobic degradation of particulate organic matter. *Bioresource Technology* 56, 229–237. [https://doi.org/10.1016/0960-8524\(96\)00034-X](https://doi.org/10.1016/0960-8524(96)00034-X)
- Veeh, R.H., Inskeep, W.P., Camper, A.K., 1996. Soil Depth and Temperature Effects on Microbial Degradation of 2,4-D. *J. ENVIRON.QUAL.* 25, 8.
- Verhulst, P.-F., 1838. Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. *Correspondance Mathématique et Physique* 10, 113–126.
- Vieublé Gonod, L., Chenu, C., Soulas, G., 2003. Spatial variability of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) mineralisation potential at a millimetre scale in soil. *Soil Biology and Biochemistry* 35, 373–382. [https://doi.org/10.1016/S0038-0717\(02\)00287-0](https://doi.org/10.1016/S0038-0717(02)00287-0)

- Vinther, F.P., Brinch, U.C., Elsgaard, L., Fredslund, L., Iversen, B.V., Torp, S., Jacobsen, C.S., 2008. Field-Scale Variation in Microbial Activity and Soil Properties in Relation to Mineralization and Sorption of Pesticides in a Sandy Soil. *Journal of Environmental Quality* 37, 1710–1718. <https://doi.org/10.2134/jeq2006.0201>
- Vogel, L.E., Makowski, D., Garnier, P., Vieublé Gonod, L., Coquet, Y., Raynaud, X., Nunan, N., Chenu, C., Falconer, R., Pot, V., 2015. Modeling the effect of soil meso- and macropores topology on the biodegradation of a soluble carbon substrate. *Advances in Water Resources* 83, 123–136. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2015.05.020>
- Vos, M., Wolf, A.B., Jennings, S.J., Kowalchuk, G.A., 2013. Micro-scale determinants of bacterial diversity in soil. *FEMS Microbiology Reviews* 37, 936–954. <https://doi.org/10.1111/1574-6976.12023>
- Wadman, W.P., de Haan, S., 1997. Decomposition of organic matter from 36 soils in a long-term pot experiment. *Plant and Soil* 187, 289–301.
- Wagai, R., Mayer, L.M., Kitayama, K., 2009. Nature of the “occluded” low-density fraction in soil organic matter studies: A critical review. *Soil Science and Plant Nutrition* 55, 13–25. <https://doi.org/10.1111/j.1747-0765.2008.00356.x>
- Wang, Z.-W., Li, Y., 2014. A theoretical derivation of the Contois equation for kinetic modeling of the microbial degradation of insoluble substrates. *Biochemical Engineering Journal* 82, 134–138. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2013.11.002>
- Warner, D.L., Bond-Lamberty, B., Jian, J., Stell, E., Vargas, R., 2019. Spatial Predictions and Associated Uncertainty of Annual Soil Respiration at the Global Scale. *Global Biogeochemical Cycles* 33, 1733–1745. <https://doi.org/10.1029/2019GB006264>
- Wertz, S., Degrange, V., Prosser, J.I., Poly, F., Commeaux, C., Freitag, T., Guillaumaud, N., Roux, X.L., 2006. Maintenance of soil functioning following erosion of microbial diversity. *Environmental Microbiology* 8, 2162–2169. <https://doi.org/10.1111/j.1462-2920.2006.01098.x>
- Wezel, A., Bellon, S., Doré, T., Francis, C., Vallod, D., David, C., 2009. Agroecology as a science, a movement and a practice. A review. *Agronomy for Sustainable Development* 29, 503–515. <https://doi.org/10.1051/agro/2009004>
- Worrich, A., König, S., Banitz, T., Centler, F., Frank, K., Thullner, M., Harms, H., Miltner, A., Wick, L.Y., Kästner, M., 2016. Bacterial Dispersal Promotes Biodegradation in Heterogeneous Systems Exposed to Osmotic Stress. *Frontiers in Microbiology* 7. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2016.01214>
- Xu, L., Baldocchi, D.D., Tang, J., 2004. How soil moisture, rain pulses, and growth alter the response of ecosystem respiration to temperature: RAIN, GROWTH, AND RESPIRATION. *Global Biogeochemical Cycles* 18, n/a-n/a. <https://doi.org/10.1029/2004GB002281>
- Young, I.M., 2004. Interactions and Self-Organization in the Soil-Microbe Complex. *Science* 304, 1634–1637. <https://doi.org/10.1126/science.1097394>

- Young, I.M., Crawford, J.W., Nunan, N., Otten, W., Spiers, A., 2008. Chapter 4 Microbial distribution in soils, in: *Advances in Agronomy*. Elsevier, pp. 81–121. [https://doi.org/10.1016/S0065-2113\(08\)00604-4](https://doi.org/10.1016/S0065-2113(08)00604-4)
- Zelenev, V.V., van Bruggen, A.H.C., Semenov, A.M., 2005. Modeling wave-like dynamics of oligotrophic and copiotrophic bacteria along wheat roots in response to nutrient input from a growing root tip. *Ecological Modelling* 188, 404–417. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2005.01.046>

Titre : Modélisation de la dégradation bactérienne de solutés organiques dans les sols :
Impact couplé des traits biologiques bactériens, des répartitions spatiales et des processus de transport

Mots clés : Dégradation bactérienne ; Hétérogénéité spatiale ; Traits bactériens ; Croissance ratio-dépendante ; Modèle de transport bioréactif

Résumé : Les sols contribuent à assurer une grande partie des besoins humains essentiels. Mieux les préserver implique de mieux les comprendre. Le carbone organique est l'un des éléments clés de leur fonctionnement, mais les processus qui régissent sa dégradation à l'échelle des microorganismes sont encore difficiles à élucider, en partie à cause de la complexité spatiale considérable du sol. L'objectif de cette thèse a été de comprendre comment les processus de transport et les répartitions spatiales de bactéries et de carbone dissout influençaient la dégradation de ce dernier par les bactéries.

La confrontation d'expériences numériques et d'observations a montré que cette question ne

pouvait pas être résolue sans connaître les traits biologiques des bactéries. En fonction de l'efficacité des bactéries à consommer le carbone, leur activité peut être limitée tantôt par la dilution du carbone, tantôt par la compétition pour le carbone même au sein d'une même population. La généralisation de ces résultats suggère que la compétition entre bactéries joue un rôle répandu et significatif dans les sols, et met en lumière une activité inattendue des zones « pauvres » du sol. Plus généralement, les résultats permettent de suggérer une relation théorique entre la mobilité du carbone, la mobilité optimale des bactéries, leur localisation optimale dans le sol et leur efficacité optimale de consommation du carbone.

Title : Modeling of bacterial degradation of organic solutes in soil:
Coupled impact of life-history bacterial traits, spatial distributions and transport processes

Keywords: Bacterial degradation ; Spatial heterogeneity ; Bacterial traits ; Ratio-dependent growth ; Bioreactive transport model

Abstract : Soils contribute to ensuring a large part of basic human needs. To better preserve them, we need to better understand them. Organic carbon is one of the key elements of their functioning, but the processes that govern its degradation at the microbial scale are still difficult to elucidate, in part because of the considerable spatial complexity of soil. The objective of this PhD thesis was to understand how the transport processes and spatial distributions of bacteria and soluble carbon influenced the degradation of the latter by bacteria.

The confrontation of numerical experiments and observations showed that this question could not be answered without knowing the biological traits of

bacteria. Depending on the efficiency of bacteria to consume carbon, their activity can be limited rather by the dilution of carbon or by the competition for carbon even within the same population. The generalization of these results suggests that competition between bacteria plays a widespread and significant role in soils, and highlights an unexpected activity of "poor" soil zones. More generally, the results suggest a theoretical relationship between carbon mobility, optimal bacterial mobility, their optimal location in soil and their optimal carbon consumption efficiency.