



## Diplôme ENS Paris-Saclay – Stage de M1

Étude de l'impact d'une population de  
méthanogènes sur le climat primitif de Mars

---

François-Xavier MEYER

31/03/2025 - 11/07/2025



Directrice de stage :

BOLMONT Émeline, Maîtresse de conférences  
*Emeline.Bolmont@unige.ch*

Observatoire de Genève  
Chemin Pegasi 51, 1290 Versoix

# Table des matières

## Table des matières

### 1 Introduction

### 2 Modèle écologique

- 2.1 Modèle initial 0-dimensionnel . . . . .
- 2.2 Modèle d'écosystème planétaire . . . . .
- 2.3 Résultats du modèle biologique . . . . .

### 3 Modèles climatiques et couplage

- 3.1 Modèle climatique 1D : Exo\_k . . . . .
- 3.2 Cas 3D : Generic-PCM . . . . .

### 4 Résultats et discussions : modèle 1D

- 4.1 Résultats du couplage . . . . .
- 4.2 Étude de sensibilité :  $r = V_{\text{cellules}}/V_{\text{océan}}$  . . . . .
- 4.3 Étude de sensibilité :  $V_{\text{océan}}$  . . . . .

### 5 Simulations 3D

- 5.1 Choix des paramètres initiaux . . . . .
- 5.2 État initial . . . . .

### 6 Conclusion

- 6.1 Améliorations possibles . . . . .
- 6.2 Conclusion générale et apport personnel . . . . .

## Références

## Étapes du stage

## Résumés

# 1 Introduction

Depuis la découverte de traces d'anciens lacs et de réseaux fluviaux à la surface de Mars [1, 2], les scientifiques cherchent des explications à la présence d'eau liquide sur Mars à la fin du Noachien (*ie* vers  $-3.7$  milliards d'années). Parmi les hypothèses explorées figure celle d'un climat chaud, rendu possible par un effet de serre dû au  $\text{CO}_2$  [3] potentiellement apporté par le volcanisme

[4] ou des événements brutaux comme des impacts d'astéroïdes [5]. Cependant, ces scénarios restent hautement improbables et il est difficile d'expliquer de façon convaincante la présence de la quantité de  $\text{CO}_2$  nécessaire pour maintenir une température supérieure au point de fusion de l'eau en certains points de la surface. Plus récemment, des études ont montré que les interactions collisionnelles induisant une absorption (CIA) entre le  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2$ , jusqu'alors négligées faute de données, ont un effet de serre très important [6, 7]. En utilisant ces nouvelles tables d'absorption et des modèles climatiques 3D, elles ont montré qu'il est possible de dépasser le point de fusion de l'eau à la surface de Mars et ainsi d'obtenir un cycle de l'eau stable à la fin du Noachien.

Ces conditions, relativement similaires à celles de la Terre primitive, auraient pu être favorables à l'émergence de la vie sous forme d'organismes méthanogènes [8] (qui consomment du  $\text{CO}_2$  et du  $\text{H}_2$  pour former du  $\text{CH}_4$ ) comme sur Terre [9]. En raison des CIA, le  $\text{H}_2$  présente un effet de serre supérieur à celui du  $\text{CH}_4$  dans une atmosphère dominée par le  $\text{CO}_2$ . Les méthanogènes pourraient donc avoir un effet refroidissant sur la planète. Le but de cette étude est d'explorer cette possibilité en couplant dans un premier temps le modèle écologique développé par Boris Sauterey [8] à un modèle climatique 1D [10] pour avoir une idée du comportement global moyen de Mars, puis dans un second temps à un modèle 3D. Cela permettrait d'identifier les emplacements privilégiés par les micro-organismes et de déterminer l'échelle de temps à laquelle le climat change sous l'effet de la vie.

Dans le cadre de cette étude, nous nous plaçons dans le cas d'une atmosphère dense, caractérisée par une pression moyenne à la surface  $P_{\text{surf}}^{\text{moy}} = 2$  bars, et composée majoritairement de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{H}_2$ . Ce choix s'appuie sur les travaux de Turbet et Forget (2021) [11], qui constituent la base du modèle 3D employé ici.

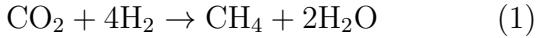
Ce rapport est structuré de la manière suivante. La section 2 décrit le modèle écologique utilisé, ainsi que les modifications apportées pour intégrer

les échanges avec l'atmosphère et les phénomènes de photodissociation et d'échappement atmosphérique. La section 3 présente brièvement les deux modèles climatiques (1D et 3D) employés dans cette étude. Enfin, les sections 4 et 5 sont respectivement consacrées aux résultats et à l'analyse du couplage entre biologie et climat dans les configurations unidimensionnelle et tridimensionnelle.

## 2 Modèle écologique

### 2.1 Modèle initial 0-dimensionnel

Le modèle écologique développé par Sauteray et al. (2022) [8] simule la dynamique de populations de micro-organismes méthanogènes (producteurs de méthane) dans l'eau, en tenant compte des contraintes physiques, chimiques et énergétiques. Ces micro-organismes, appelés méthanogènes hydrogénotrophes, tirent leur énergie de la réduction du dioxyde de carbone par l'hydrogène :



Cette réaction, appelée réaction catabolique, libère de l'énergie, utilisée ensuite pour produire de la biomasse via une réaction anabolique (synthèse cellulaire) :



La molécule  $\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}_5\text{N}_2$  représente une unité chimique typique de la biomasse, reflétant sa composition moyenne en carbone, hydrogène, oxygène et azote. Le modèle repose sur le bilan énergétique du métabolisme des méthanogènes. Pour chacune des réactions, on calcule l'énergie de Gibbs ( $\Delta G$ ). Cette dernière indique si une réaction peut se produire spontanément et quelle quantité d'énergie elle peut libérer. Elle dépend de la température et des concentrations de réactifs et de produits, selon la relation de Nernst

$$\Delta G(T) = \Delta G^\circ(T) + RT \ln(Q) \quad (3)$$

où :  $\Delta G^\circ(T)$  est l'énergie libre standard (dans des conditions de référence),  $R$  est la constante des gaz parfaits,  $T$  est la température, et  $Q$  est le quotient réactionnel (rapport des quantités de produits et de réactifs mis à la puissance de leurs stœchiométries respectives dans la réaction considérée). Connaître  $\Delta G$  permet donc de savoir si les cellules peuvent tirer de l'énergie de leur environnement pour assurer leur fonctionnement.

Les cellules doivent d'abord couvrir leurs besoins de maintenance (énergie de survie), puis, si l'énergie disponible est suffisante, produire de la biomasse. Le taux de production cellulaire net est alors :

$$q_{\text{bio}} = \lambda(q_{\text{cat}} - q_{\text{maint}}) \quad (4)$$

où :  $q_{\text{cat}}$  est le taux spécifique de la réaction catabolique (énergie acquise),  $q_{\text{maint}}$  est le taux spécifique minimal pour la maintenance cellulaire,  $\lambda$  est le rendement énergétique du métabolisme, *ie* le rapport des  $\Delta G^\circ$  entre catabolisme (Éq. (1)) et production de biomasse (Éq. (2)).

Le modèle simule simultanément, dans un volume d'eau donné, l'évolution de la population de micro-organismes et son effet sur les concentrations des gaz dissous impliqués dans les réactions métaboliques :  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$  et  $\text{CO}_2$ .

### 2.2 Modèle d'écosystème planétaire

Sans apport extérieur, les populations microbiennes des océans vont exploiter leurs substrats énergétiques jusqu'à leur épuisement complet.

Dans un contexte planétaire, ces substrats sont cependant renouvelés par le biais d'échanges avec l'atmosphère. L'influence de la biologie sur son environnement s'étend donc grâce à ces échanges à l'échelle globale de l'atmosphère martienne, qui elle-même joue un rôle prépondérant dans le climat de Mars. J'ai ainsi adapté le modèle écologique en y intégrant les processus physiques nécessaires pour représenter cette dynamique à l'échelle globale (cf. figure 1). Les paragraphes qui suivent décrivent ces différents aspects du modèle.

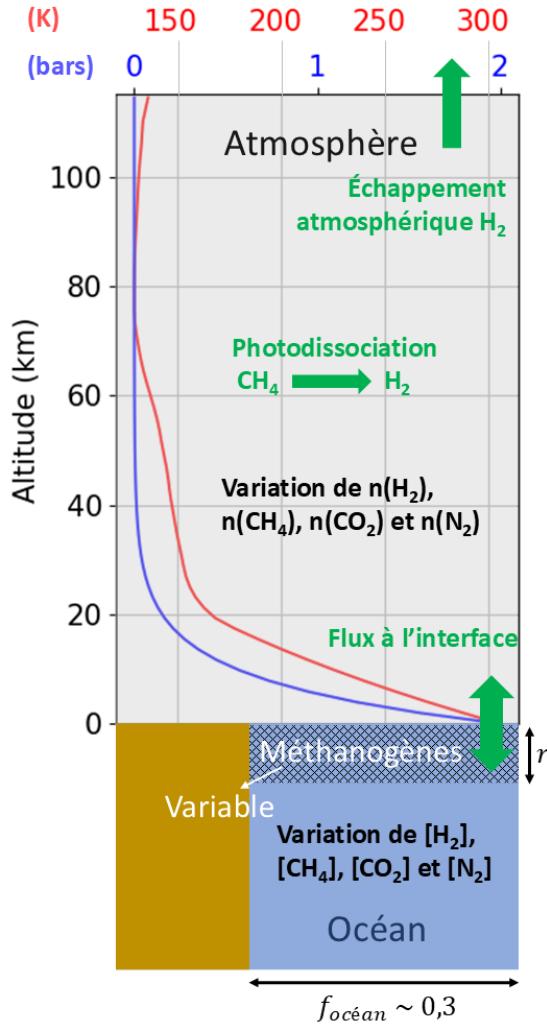


FIGURE 1 – Schéma du modèle biologique adapté dans le cas d'une atmosphère. L'axe des abscisses rouge correspond aux températures des couches de l'atmosphère et l'axe bleu aux pressions (dans l'état initial, *i.e.* sans  $\text{CH}_4$ ). Les flèches vertes correspondent aux flux de matière (cf. "Flux dans l'atmosphère" et "Flux à l'interface océan/atmosphère").  $[X]$  correspond à la concentration de l'espèce  $X$  (mol/L) dans l'océan, et  $n(X)$  à sa quantité de matière dans l'atmosphère (mol).  $r$  est le rapport du volume occupé par les cellules ; dans le cas où les cellules sont situées dans la couche supérieure mélangée (50m),  $r = 2,7 \times 10^{-2}$ .  $f_{\text{ocean}}$  est la fraction de la surface de Mars couverte par les océans.

**Colonne atmosphérique** Dans un premier temps, le modèle biologique a été restreint à une dimension verticale (altitude), ce qui a permis de paralléliser le code lors de son couplage ultérieur avec le modèle tridimensionnel (voir section 3.2). Par ailleurs, dans le but de manipuler des flux exprimés en mol/s, j'ai fait le choix de travailler directement avec des quantités de matière plutôt qu'avec des concentrations. La colonne atmosphérique étant modélisée par couches, chacune caractérisée par une pression  $P(z)$  et une température  $T(z)$ , le calcul de la quantité totale de matière repose sur la loi des gaz parfaits :  $n = \sum_z P(z)Sdz/RT(z)$ , où  $R$  est la constante des gaz parfaits,  $z$  est l'altitude et  $S$  la surface de base de la colonne. La quantité de matière  $n(X)$  d'une espèce  $X$  est ensuite obtenue en multipliant  $n$  par sa fraction molaire  $f_X$ , en supposant une atmosphère parfaitement homogène.

**Flux à l'interface océan/atmosphère** Au début de l'élaboration du modèle, je considérais que l'équilibre était atteint pour chaque gaz immédiatement, selon la loi de Henry

$$\alpha_X P_X = [X] \quad (5)$$

où  $P_X = f_X P_{\text{surf}}$  est la pression partielle de l'espèce  $X$  à la surface de l'océan,  $\alpha_X$  est le coefficient de solubilité et  $[X]$  la concentration de l'espèce  $X$  dans l'océan (considérée comme homogène dans tout l'océan). Cependant, les résultats obtenus étaient aberrants avec des concentrations en cellules supérieures à la concentration maximale autorisée au regard de la taille des cellules. Pour éviter cela, j'ai donc implémenté des flux à l'interface entre l'océan et l'atmosphère selon le modèle de la couche limite stagnante [12]. Ces flux sont donnés par (dans le sens atmosphère → océan)

$$\Phi(X) = v_p(X) \cdot (\alpha_X \cdot P_X - [X]) \quad (6)$$

où  $v_p(X)$  est la vitesse piston de  $X$  (cf. annexe A).

**Flux dans l'atmosphère** Pour plus de réalisme, et pour atteindre un équilibre, j'ai également intégré au modèle des flux entrants et sortants dans

l'atmosphère. Pour  $\text{H}_2$  et  $\text{CH}_4$ , j'ai utilisé les flux proposés par Zahnle and Kasting [13]. Le flux de  $\text{CH}_4$  est sortant uniquement car le méthane est photodissocié et il n'y a pas d'autres sources que l'activité biologique (les phénomènes comme la serpentisation sont ignorés en première approximation). La photodissociation du méthane produit notamment du  $\text{H}_2$ . Lorsqu'il y a peu de  $\text{CH}_4$  dans l'atmosphère, l'échappement atmosphérique de  $\text{H}_2$  est supérieur à la production via la photodissociation, mais cette tendance s'inverse passé un certain seuil et il y a alors un apport de  $\text{H}_2$  comme cela est illustré par la figure 2.

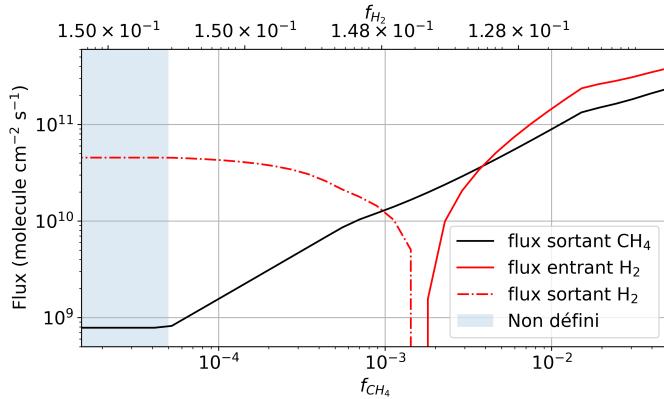


FIGURE 2 – Flux de  $\text{H}_2$  et de  $\text{CH}_4$  dans l'atmosphère. L'axe supérieur correspond à la fraction de  $\text{H}_2$  dans l'atmosphère lorsqu'a été produit  $f_{\text{CH}_4}$  de méthane par les cellules suivant l'Éq. (1). Figure réalisée par B. Sauterey.

On ne considère aucun flux de  $\text{CO}_2$  dans l'atmosphère : le flux lié au volcanisme est très faible [14] ( $\sim 10^7$  molécules/ $\text{cm}^2/\text{s}$  à comparer à des flux supérieurs à  $10^{10}$  molécules/ $\text{cm}^2/\text{s}$  pour le  $\text{CH}_4$  et le  $\text{H}_2$ ), en particulier par rapport à la quantité de matière globale de  $\text{CO}_2$  ( $\sim 1,5 \cdot 10^{20}$  mol) et aux échelles de temps considérées ( $10^2$  à  $10^4$  années). De plus, tout comme le  $\text{N}_2$ , le  $\text{CO}_2$  est une molécule lourde donc l'échappement atmosphérique de ces deux molécules peut être négligé.

Ainsi sont uniquement pris en compte la photodissociation du  $\text{CH}_4$  et l'échappement atmosphérique du  $\text{H}_2$ .

**Emplacement des cellules** Un des problèmes majeurs du modèle était de savoir où se situaient les cellules. Les méthanogènes considérés dans le modèle écologique se développent dans l'eau, mais il fallait déterminer la profondeur jusqu'à laquelle ils peuvent croître. Tout d'abord, j'ai considéré que l'océan était suffisamment riche en nutriments pour que ces derniers, difficiles à quantifier, n'aient pas d'impact sur l'emplacement des cellules. Je me suis ensuite basé sur l'étude de F. Codron (2012) [15] pour considérer que la couche bien mélangée de l'océan est d'une épaisseur de 50m. En deçà de cette profondeur, les gaz dissous sont consommés par les cellules, mais ne sont pas régénérés suffisamment rapidement pour maintenir les cellules en vie. C'est pourquoi dans cette étude, les cellules sont uniquement situées dans la première couche de l'océan, d'une épaisseur de 50m. Cette hypothèse n'est pas cohérente avec celle de l'océan globalement bien mélangé pour les espèces chimiques, et cela constitue une limite de ce modèle qu'il faudra explorer lors d'une prochaine étude.

**Salinité** Enfin, on sait que sur Terre le pH et la salinité de l'eau ont un impact important sur le développement de la vie. Cependant, peu d'études ont cherché à déterminer la salinité d'un océan boréal à la fin du Noachien, et la seule étude sur ce sujet [16] donne une estimation de 10 à 20 g/L de NaCl dans l'eau (à comparer aux 35 g/L actuels des océans terrestres). J'ai donc décidé de ne pas tenir compte de l'influence de ces deux paramètres sur l'évolution des cellules. La salinité étant en revanche extrêmement élevée dans les lacs situés dans les hautes terres de l'hémisphère sud (voir les annexes B et C)[17], on considère que la vie ne s'y est pas développée.

### 2.3 Résultats du modèle biologique

Les résultats de l'intégration complète du modèle biologique sont présentés ici, à partir de conditions initiales fixées : une pression totale de  $P = 2$  bars, une température de  $T = 310$  K, et une composition atmosphérique initiale donnée par  $f_{\text{CH}_4} = 0$ ,

$f_{\text{H}_2} = 0,15$ ,  $f_{\text{N}_2} = 0,04$  et  $f_{\text{CO}_2} = 0,81$ . Toutes les concentrations initiales en solution sont supposées nulles.

Les évolutions des concentrations en cellules et en espèces chimiques dissoutes, ainsi que la composition de l'atmosphère au cours du temps sont illustrées par la figure 3.

On observe que la concentration en cellules atteint une valeur stable relativement rapidement, après environ une centaine de jours. En revanche, la composition de l'atmosphère évolue plus lentement. Cette différence de dynamique s'explique par la production continue de  $\text{CH}_4$  par les cellules et par les échanges progressifs entre l'océan et l'atmosphère, qui permettent au méthane de s'y accumuler. De la même manière, partant de concentrations nulles, toutes les espèces dissoutes voient leur concentration augmenter avant de tendre vers une valeur limite, déterminée par l'intensité des flux à l'interface océan-atmosphère et par le nombre de cellules. Les oscillations que l'on voit au début de l'évolution du système sont causées par une croissance trop abrupte de la population de cellules, ce qui impacte la concentration de dihydrogène dans l'océan de façon significative.

Cependant, l'impact du changement de composition de l'atmosphère sur la température n'est pas pris en compte ici. La section suivante présente les couplages bioclimatiques qui permettent de remédier à cela.

### 3 Modèles climatiques et couplage

Cette section propose une brève présentation des modèles climatiques 1D et 3D et de leur couplage avec le modèle biologique 1D.

#### 3.1 Modèle climatique 1D : Exo\_k

L'objectif final de cette projet est d'étudier l'impact des méthanogènes sur le climat primitif de Mars avec un modèle 3D. Cependant, l'inconvénient majeur d'un tel modèle climatique est

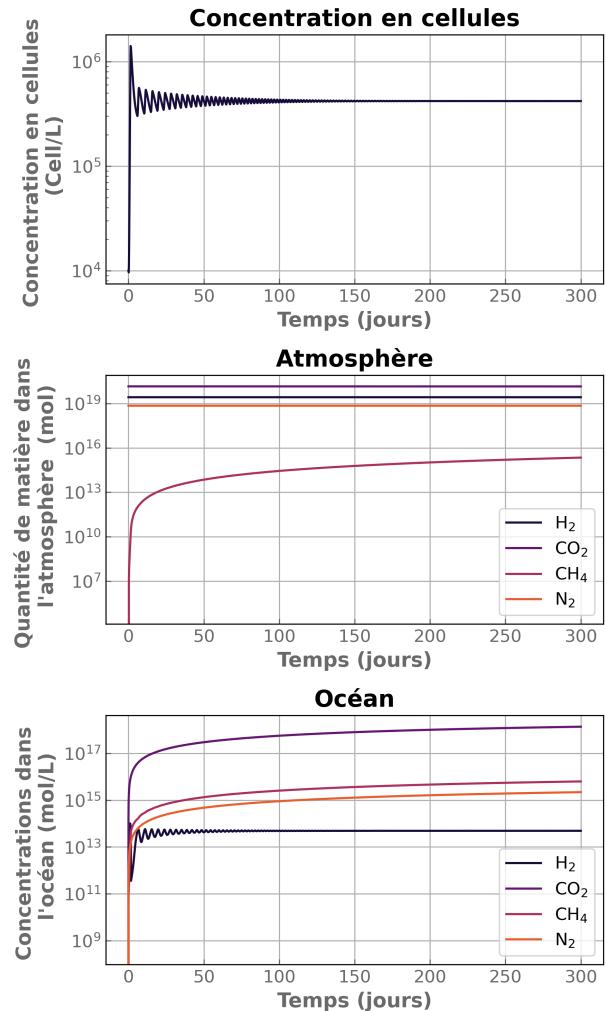


FIGURE 3 – Évolution temporelle des concentrations en cellules, en espèces chimiques dissoutes et de la composition atmosphérique dans les conditions décrites par le texte.

le temps de calcul important qu'il nécessite. Pour valider l'hypothèse initiale (les méthanogènes vont refroidir la planète) et ma procédure ainsi que pour faire des études de sensibilité, j'ai préféré utiliser un modèle climatique 1D, moins précis mais très rapide. Dans cette section, je présenterai brièvement le modèle Exo\_k, puis je justifierai les paramètres initiaux adoptés dans cette étude, et enfin j'expliquerai la manière dont ce modèle a été couplé au modèle biologique présenté plus haut.

**Modèle** Le modèle Exo\_k [10] est un outil numérique développé pour simuler l'évolution thermodynamique d'atmosphères planétaires en une dimension. Il repose sur une représentation en couches verticales de l'atmosphère, chacune caractérisée par sa pression et sa température.

Le transfert radiatif est basé sur une approche à deux flux [18]. Il repose sur la méthode des coefficients  $k$  corrélés, qui permet de représenter de manière simplifiée mais précise la complexité spectrale de l'opacité atmosphérique. Le modèle prend en compte différentes sources d'opacité, comme la diffusion Rayleigh, les absorptions induites par collision (CIA), et les opacités des gaz (issues de bases de données comme HITRAN [19] ou ExoMol [20]). Exo\_k génère ainsi de manière autonome des grilles d'opacité adaptées à différentes compositions atmosphériques (cf. annexe D).

Le modèle permet également de faire évoluer temporellement la structure atmosphérique en tenant compte des processus radiatifs et convectifs. Il permet ainsi d'obtenir une structure verticale de l'atmosphère à l'équilibre à partir d'une température et d'une pression de surface ainsi qu'une composition atmosphérique donnée.

**Paramètres** L'objectif principal de ce modèle est de produire des profils verticaux de température et de pression représentatifs des conditions thermodynamiques de l'atmosphère, avec un bon niveau de précision, en optimisant cependant le temps de calcul. Pour ce faire, seuls les mécanismes physiques principaux affectant l'opacité de l'atmosphère ainsi que ses propriétés thermiques ont été inclus dans le modèle comme la diffusion Rayleigh, la convection ou la diffusion thermiques (cf. tableau 1).

Par ailleurs, la pression atmosphérique initiale est fixée à 2 bars et l'atmosphère est composée initialement de 81% de CO<sub>2</sub>, 15% de H<sub>2</sub> et 4% de N<sub>2</sub>. Ce choix s'appuie sur l'étude de Turbet et Forget (2021) [11], mais en diffère légèrement. En effet, pour assurer la stabilité du modèle biologique, j'ai ajouté une faible fraction de N<sub>2</sub> dans l'atmosphère.

Diffusion Rayleigh	✓
Convection	✓
Transport par convection	✓
Diffusion	✓
Condensation	✗
Pluie	✗
Poussière	✗
Vapeur d'eau	✗
Nuages	✗

TABLE 1 – Phénomènes physiques pris en compte dans le modèle

**Couplage** Le principal défi du couplage des deux modèles réside dans les échelles de temps très différentes : quelques jours pour le développement cellulaire, des dizaines d'années pour leur impact sur l'atmosphère, et environ une année pour que le climat atteigne son équilibre. De plus, le temps de calcul des modèles climatiques étant particulièrement long, il n'était pas possible de simplement adapter le modèle climatique en y intégrant la biologie. Les deux modèles ont donc été exécutés séquentiellement (cf. figure 4).

Dans le cas 1D, un premier appel au modèle climatique permet de trouver l'équilibre pré-biotique, *i.e* lorsque la vie n'est pas encore apparue. Cet équilibre donne alors des conditions de pression-/température à la surface de l'eau. La température de surface est extrapolée à la première couche de l'océan dans laquelle les cellules se trouvent. En utilisant ensuite le modèle biologique, on peut faire évoluer le système complet { Atmosphère + Océan }. On sait par ailleurs que l'augmentation de la fraction de CH<sub>4</sub> dans l'atmosphère fait varier la température. On utilise donc un seuil limite de CH<sub>4</sub> dans l'atmosphère pour stopper le modèle biologique. On recalcule alors les paramètres physiques grâce à Exo\_k, puis on recommence à faire évoluer le système, et ainsi de suite jusqu'à ce que la température passe sous la température de fusion de l'océan ( $T_{fus} \simeq 271\text{K}$  comme sur Terre). L'océan est alors gelé, et le modèle s'arrête en considérant que toute activité biologique cesse dans

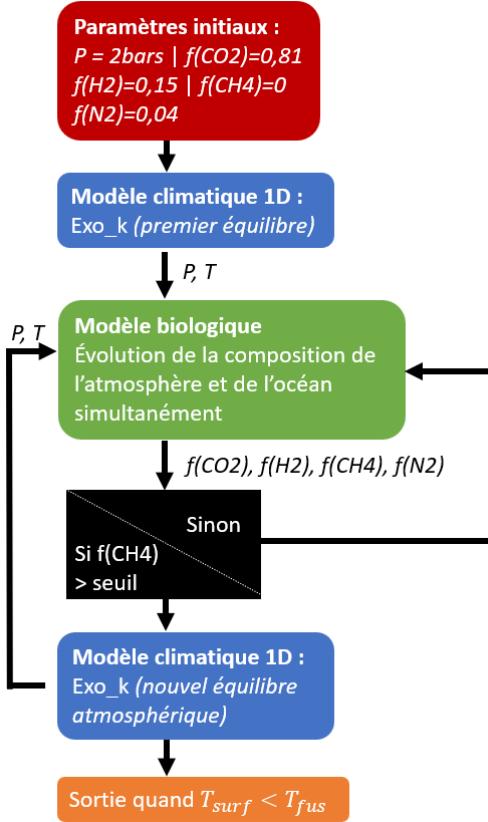


FIGURE 4 – Schéma du modèle biologique dans le cas unidimensionnel. On retrouve en bleu les appels au modèle climatique, en vert l'utilisation du modèle biologique, en rouge les paramètres initiaux (cf. paragraphe "Paramètres") et en orange la condition de sortie du modèle.

l'océan. Bien que sur Terre une certaine activité métabolique subsiste dans les océans gelés, celle-ci est extrêmement réduite. La glace limite aussi considérablement les échanges entre l'océan et l'atmosphère. Par souci de simplification, le modèle considère donc que toute activité biologique cesse une fois l'océan gelé.

### 3.2 Cas 3D : Generic-PCM

Il a été dit plus haut qu'un modèle climatique 3D est bien plus coûteux temporellement qu'un modèle 1D. Cependant, il est possible que certains effets physiques n'apparaissent qu'en 3D, ce qui nécessite l'utilisation d'un tel modèle. Illustrons cela : dans le

modèle 1D, la température de surface est constante. En 3D cette dernière est variable, et l'océan va pouvoir geler à certains endroits alors que les cellules auront encore une activité métabolique dans d'autres zones. Cela va induire un ralentissement de la production de méthane, qui n'apparaît pas en 1D.

**Modèle** Le Generic-PCM (Planetary Climate Model) utilisé ici est le modèle développé principalement par le Laboratoire de Météorologie Dynamique, et connu sous le nom de LMDZ [21]. Il se base sur les équations de la météorologie (équation de Navier-Stokes, conservation de la masse, thermodynamique : pour plus de détails, se référer à l'annexe E) et sur des phénomènes physiques comme les cycles de l'eau et de la poussière, les turbulences, le transfert radiatif ou la photochimie (qui ne sera pas utilisée dans cette étude). Dans notre cas, ce modèle renvoie l'évolution temporelle d'un grand nombre de variables définissant le climat de la planète Mars pour une composition d'atmosphère donnée. Il renvoie en particulier la pression, la température et les données relatives à l'eau, comme la quantité d'eau liquide à la surface ou la quantité de vapeur d'eau dans l'atmosphère. Les grilles d'opacité doivent être calculées manuellement avant chaque appel au G-PCM.

**Paramètres** Les paramètres initiaux du G-PCM que j'ai utilisés pour cette étude sont très largement basés sur l'article de Turbet et Forget [11]. La surface utilisée correspond à la surface de Mars avant le True Polar Wander (cf. annexe B). La pression moyenne à la surface est fixée à 2 bars. Un océan est présent au niveau du cratère de *Hellas* et de *Vastitas Borealis*, correspondant à un couche équivalente globale (GEL) de 550m et à une surface océanique située à -2540m. Cet océan est considéré dans le G-PCM comme un réservoir infini d'eau, *i.e.* son volume ne change pas et il n'y a donc pas de limite à la quantité d'eau présente dans l'atmosphère. La composition de l'atmosphère et la pression moyenne à la surface sont définies comme pour le modèle 1D (cf. section 3.1).

**Couplage** Comme dans le modèle unidimensionnel (cf. section 3.1), le couplage en 3D repose sur une exécution séquentielle des différents modèles (cf. figure 5).

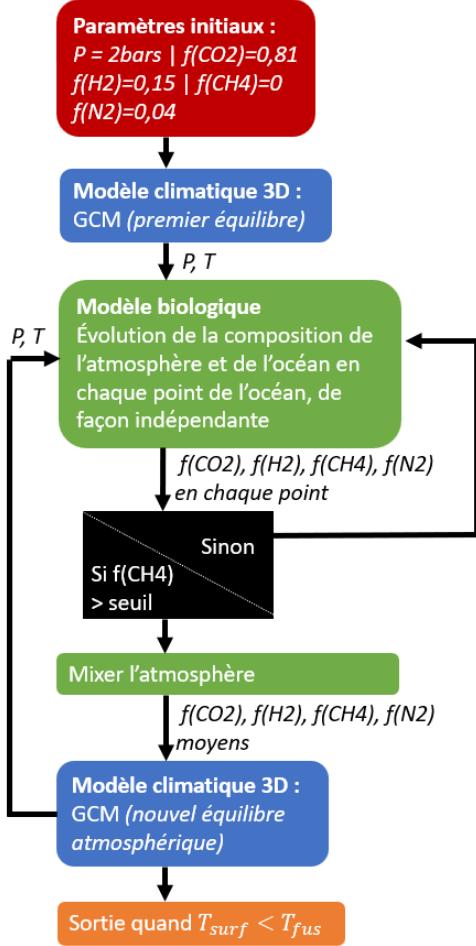


FIGURE 5 – Schéma du modèle biologique dans le cas tridimensionnel. On retrouve en bleu les appels au modèle climatique, en vert l'utilisation du modèle biologique, en rouge les paramètres initiaux (cf. paragraphe "Paramètres") et en orange la condition de sortie du modèle. La comparaison à la fraction de méthane à la fin du modèle biologique est utilisée pour la cellules produisant le plus rapidement le CH<sub>4</sub>; cela définit ensuite un temps de simulation commun à toutes les cellules.

Toutefois, à la différence du cas 1D, les conditions physiques de l'océan varient spatialement : le modèle biologique unidimensionnel est donc appliqué indépendamment à chaque point océanique

de la grille spatiale utilisée.

Pour optimiser les temps de calcul, ces appels au modèle biologique sont effectués en parallèle, ce qui empêche toute interaction entre les cellules au cours d'une même itération. Chaque point est ainsi considéré comme isolé, ce qui constitue une approximation. Cette limitation est partiellement compensée par l'hypothèse que l'atmosphère reste parfaitement homogène à l'échelle planétaire : à l'issue de chaque appel au modèle biologique, la composition atmosphérique est entièrement mélangée et uniformisée.

## 4 Résultats et discussions : modèle 1D

### 4.1 Résultats du couplage

Les résultats préliminaires du modèle 1D sont satisfaisants dans l'ensemble. Ils sont globalement cohérents avec ce à quoi l'on pouvait s'attendre et confirment l'hypothèse initiale : les méthano-gènes entraînent un refroidissement global de la planète.

**Température** On observe sur la figure 6 (Haut) que la température augmente rapidement avant de décroître linéairement jusqu'à passer sous la température de fusion de l'océan. Cette brusque augmentation de la température s'explique par l'introduction de CH<sub>4</sub> dans l'atmosphère. Ce dernier étant un gaz à effet de serre, son ajout augmente la température de surface de la planète. Cependant, lorsque le méthane atteint des proportions importantes ( $f_{CH_4} > 1000$  ppm, cf. figure 6) (Bas), la quantité de H<sub>2</sub> dans l'atmosphère diminue fortement, et l'effet des CIA s'atténue. Cette diminution devient plus importante que l'effet de serre du méthane et la température décroît donc.

**Pression** Par ailleurs, la pression diminue au cours du temps (cf. figure 6 (Milieu)) car, selon les coefficients stoechiométriques des réactions métaboliques, les cellules consomment davantage

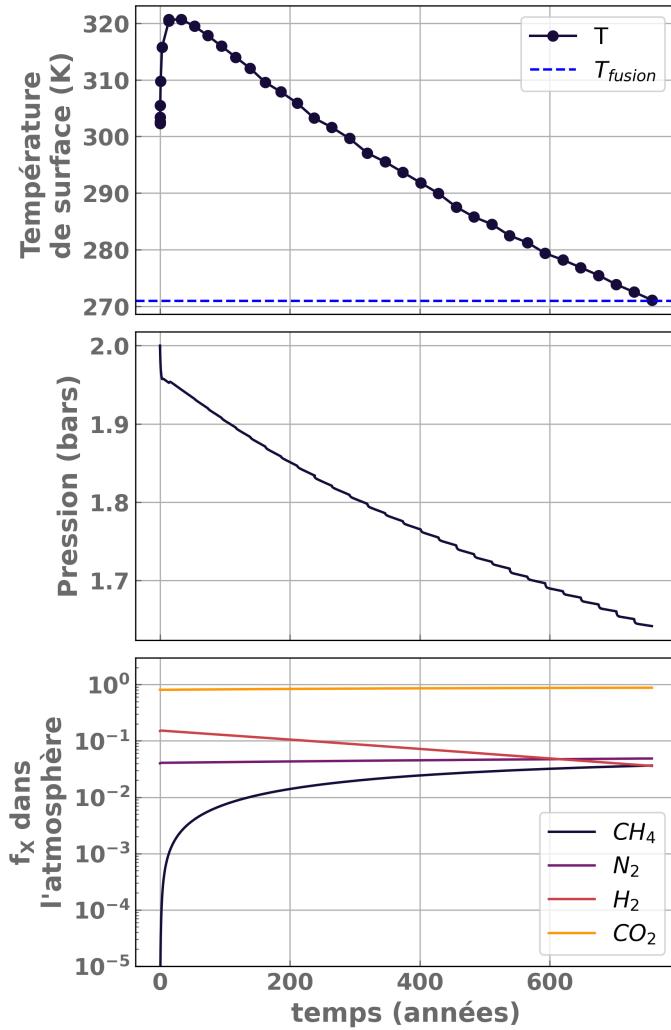


FIGURE 6 – (Haut) Température de surface en fonction du temps lors du couplage entre les modèles biologique et climatique en 1D. Chaque point correspond à un appel au modèle climatique. (Milieu) Pression de surface en fonction du temps pour le couplage en 1D. Il y a plus de gaz consommé que de gaz produit, la pression diminue donc avec le temps. (Bas) Évolution de la composition de l'atmosphère (ratios des gaz) en fonction du temps. Le  $\text{CH}_4$  augmente dans l'atmosphère car il est produit par les méthano-gènes, tandis que le  $\text{H}_2$  diminue car il est consommé.

de gaz qu'elles n'en produisent. Chacune des petites discontinuités visibles sur la courbe correspond à un appel au modèle climatique. L'objectif à terme sera de faire disparaître ces instabilités (cf. section 6.1).

**Composition dans l'atmosphère** Les méthano-gènes consomment le  $\text{H}_2$  et le  $\text{CO}_2$  en rejetant du  $\text{CH}_4$ . La fraction de méthane augmente donc tandis que celle de dihydrogène diminue. La quantité de matière de  $\text{CO}_2$  diminue également, mais son ratio dans l'atmosphère augmente car la quantité de matière totale dans l'atmosphère diminue plus rapidement que celle de  $\text{CO}_2$ . Cela est illustré par la figure 6 (Bas).

**Nombre de cellules** Comme on peut le voir sur la figure 7 (Haut), la concentration en cellules a une évolution opposée à celle de la température. Cela s'explique par une croissance cellulaire favorisée à basse température, en partie grâce à un flux accru de  $\text{CO}_2$  de l'atmosphère vers l'océan. En effet, la solubilité du  $\text{CO}_2$ , qui gouverne ce flux, diminue avec la température (cf. annexe A). On a alors davantage de réactifs dans l'océan, et bien que les taux métaboliques diminuent, la réaction est suffisamment favorisée pour que cet effet l'emporte.

**Concentrations dans l'océan** La figure 7 (Haut) présente l'évolution de la concentration des espèces chimiques principales ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$  et  $\text{CO}_2$ ) dans l'océan.

La concentration en  $\text{CH}_4$  atteint rapidement une valeur de quasi-saturation, déterminée par l'équilibre des flux à l'interface, tout comme la concentration de  $\text{N}_2$ . En revanche, la concentration de  $\text{H}_2$  diminue dans un premier temps en tendant vers un équilibre avec l'atmosphère, où la fraction de  $\text{H}_2$  diminue également. Toutefois, en fin de simulation, on observe un léger rebond de la concentration en  $\text{H}_2$  dans l'océan. Celui-ci s'explique par une augmentation du taux de photodissociation du méthane, devenu significatif du fait de sa forte concentration atmosphérique. Cela conduit à une production secondaire de  $\text{H}_2$ , qui stoppe temporairement sa diminution.

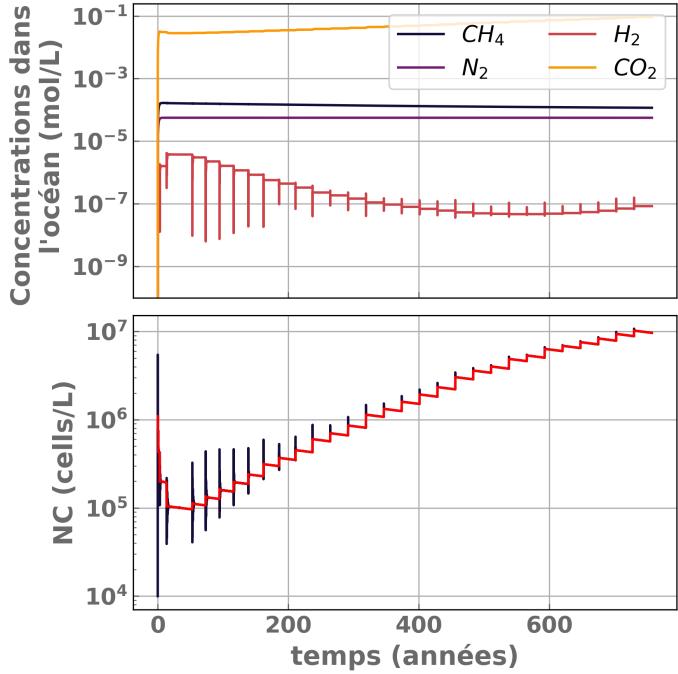


FIGURE 7 – (Haut) Évolution de la concentration en espèces chimiques dans l’océan. Les pics qui apparaissent sur la courbe de la concentration correspondent aux instabilités qui apparaissent après un appel au modèle climatique. (Bas) Évolution de la concentration en méthanolignes dans l’océan en fonction du temps. Les pics de la courbe noirs sont également causés par les instabilités. La courbe rouge correspond à la courbe que l’on devrait avoir s’il n’y avait pas d’instabilités dans le système.

#### 4.2 Étude de sensibilité : $r = V_{\text{cellules}}/V_{\text{ocean}}$

Pour étudier la sensibilité de l’évolution de la concentration de cellules vis-à-vis du rapport  $r = V_{\text{cellules}}/V_{\text{ocean}}$ , j’ai tracé cette évolution pour différentes valeurs de  $r$ , en considérant plusieurs combinaisons de  $P$ ,  $T$  et  $f_{\text{CH}_4}$ . La figure 8 montre le cas  $P = 2$  bars,  $T = 300\text{K}$  et  $f_{\text{CH}_4} = 0$ .

Il apparaît que, pour tous les triplets  $(P, T, f_{\text{CH}_4})$ , la concentration à l’équilibre est proportionnelle à  $1/r$ . Cela implique donc que le nombre de cellules est constant pour tout  $r$ , avec  $r$  raisonnable, *i.e.* lorsque les cellules ont un volume suffisant pour se développer. Ce comportement s’explique par la dépendance de l’équilibre aux flux à l’interface, eux-mêmes proportionnels à la surface de l’océan. Comme cette surface ne varie pas, le système converge systématiquement vers une valeur constante du nombre de cellules. Il en résulte que les concentrations des gaz dissous dans l’océan seront strictement identiques pour toutes les valeurs de  $r$  (cf. annexe F). Le système se comportera donc de la même manière que pour les valeurs prises dans cette étude indépendamment de  $r$ .

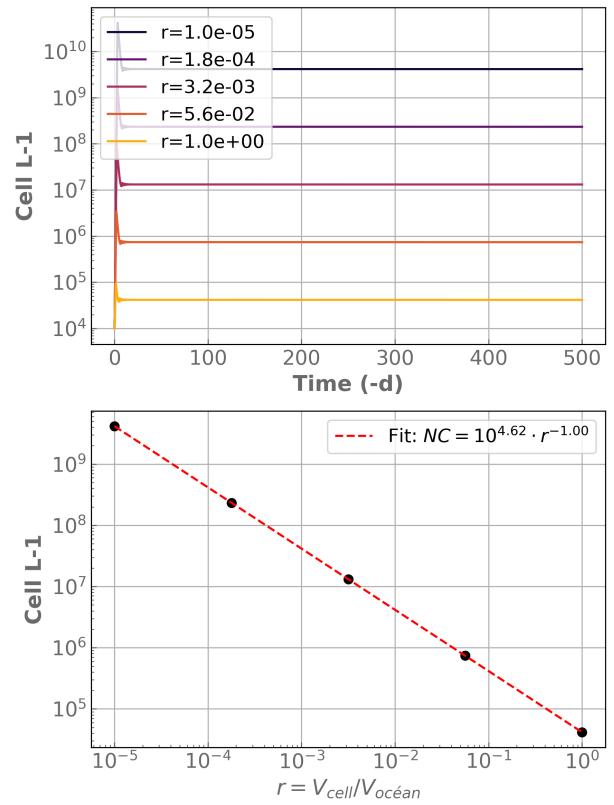


FIGURE 8 – (Haut) Évolution temporelle de la concentration en cellules en fonction de la valeur de  $r = V_{\text{cellules}}/V_{\text{ocean}}$ . (Bas) Valeur à l’équilibre de la concentration en cellules  $NC$  en fonction de la valeur de  $r$  et régression linéaire correspondante. On a  $NC \propto 1/r$ .

#### 4.3 Étude de sensibilité : $V_{\text{ocean}}$

Dans cette étude, je me suis appuyé sur le cas étudié par Turbet et Forget [11] où le volume

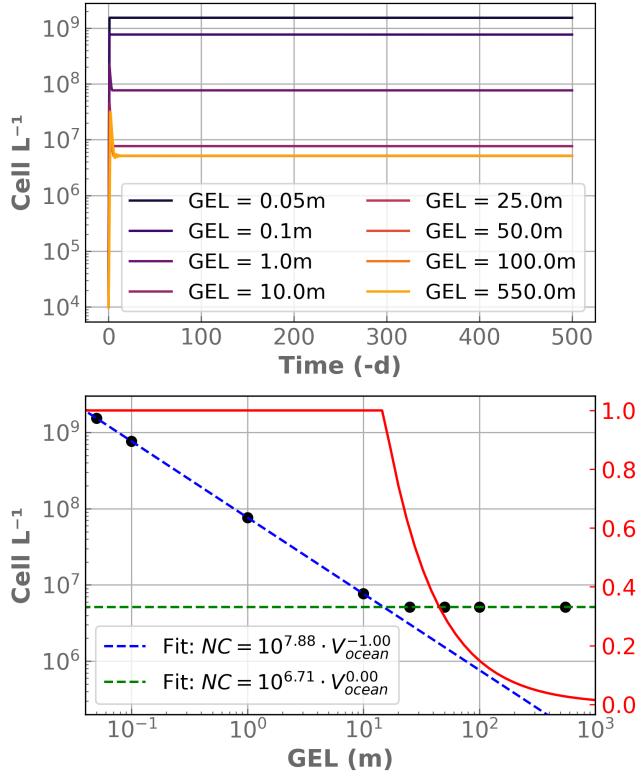


FIGURE 9 – (Haut) Évolution temporelle de la concentration en cellules en fonction de la valeur de  $V_{\text{ocean}}$ . (Bas) Valeur à l'équilibre de la concentration en cellules  $NC$  en fonction de la valeur de GEL. Sont également affichées les régressions linéaires correspondant aux parties de la courbe  $r = 1$  (bleu) et  $r \neq 1$  (vert). En rouge est tracé la valeur de  $r$  en fonction de la couche équivalente globale.

$V_{\text{ocean}}$  des océans sur Mars correspond à une couche équivalente globale de 550m. Cependant, il n'y a pas aujourd'hui de consensus scientifique sur ce volume, et ce dernier a par ailleurs pu évoluer au fil du temps. Il m'a donc semblé important d'étudier l'impact de  $V_{\text{ocean}}$  sur le développement des cellules. Pour cela, j'ai analysé plusieurs configurations correspondant à des triplets ( $P$ ,  $T$ ,  $f_{\text{CH}_4}$ ) différents. La figure 9 représente le cas (2 bars, 300K, 0).

Dans toutes ces simulations, la couche où sont situées les cellules correspond aux 50 premiers mètres de l'océan. Si l'océan est moins profond, les cellules occupent alors tout le volume disponible.

La surface de l'océan est fixée.

Deux régimes apparaissent clairement : le premier lorsque  $r = 1$  (les cellules occupent tout l'océan), et l'autre quand  $r \neq 1$ . Dans le premier cas, on retrouve  $NC \propto 1/r$  comme dans la partie précédente. Lorsque  $r$  commence à diminuer, on entre dans le deuxième cas : la zone où peuvent habiter les cellules est maximale, et leur concentration se stabilise. Comme dans le cas précédent, il apparaît que le nombre de cellules est constant pour des valeurs raisonnables de  $V_{\text{ocean}}$ . Les concentrations des gaz dans l'océan vont donc tendre vers les mêmes valeurs pour toutes les valeurs de GEL (cf. annexe G). Il est cependant intéressant de noter que le temps caractéristique d'évolution des concentrations augmente avec le volume de l'océan. Le temps nécessaire pour passer sous la température de fusion sera donc plus long à mesure que le volume de l'océan sera important.

## 5 Simulations 3D

### 5.1 Choix des paramètres initiaux

Les simulations ainsi que l'étude de sensibilité réalisées en 1D avaient en grande partie pour but de choisir avec discernement les paramètres du couplage entre le modèle biologique et le *G-PCM*. En effet, alors que trouver l'équilibre climatique prenait seulement quelques secondes avec *Exo\_k*, cela prend plusieurs jours en 3D. Le nombre de simulations pouvant être lancées est de ce fait considérablement réduit, et le choix des paramètres initiaux devient crucial.

L'étude de la sensibilité du couplage bioclimatique vis-à-vis de  $r$  a montré que cette variable n'avait aucun impact, tant que  $r$  reste dans une plage raisonnable. On peut donc choisir de prendre  $r \sim 0,3 \Rightarrow d_{\text{zone des cellules}} = 50\text{m}$  sans introduire d'erreur notable, bien que cette valeur reste relativement arbitraire.

Par ailleurs, on a vu aussi que le volume  $V_{\text{ocean}}$  n'a pas d'impact sur le nombre total de cellules présentes dans l'océan. La valeur exacte de la GEL

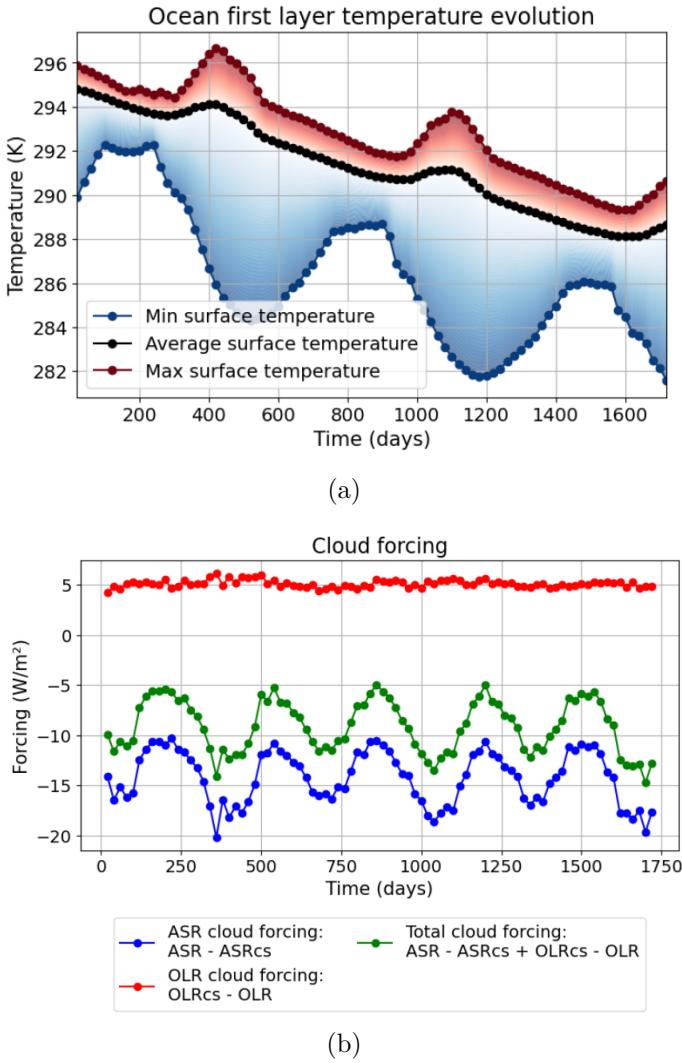


FIGURE 10 – (a) Évolution temporelle de la température moyenne de la première couche de l’océan à partir d’un état initial hors équilibre. Les oscillations correspondent aux années martiennes (669 jours terrestres) et la température descend globalement car la température initiale est trop élevée par rapport à la température d’équilibre. (b) Forçage radiatif des nuages. Il est négatif (courbe verte = bleue + rouge), ce qui implique que les nuages ont un effet global refroidissant. Pour plus de détails, se référer à l’annexe H

n’a donc pas d’importance d’un point de vue biologique. On gardera  $GEL = 550\text{m}$  pour se placer dans la suite de l’étude de Turbet et Forget [11].

Le reste des paramètres, comme la pression ou la topographie, a déjà été évoqué dans la partie 3.2.

## 5.2 État initial

A l’heure de rédaction de ce rapport, les simulations climatiques sont toujours en cours afin d’atteindre l’état d’équilibre pré-biotique du climat martien. Comme elles ne sont pas encore terminées, aucun résultat du couplage en 3D n’est disponible. On peut cependant noter une tendance qui apparaît.

La température de surface et donc la température de la première couche de l’océan sont plus froides que la température à l’état initial dans le modèle climatique 1D (cf. figures 6 (Haut) et 10(a)). Cela est dû à l’absence de nuages dans le modèle climatique 1D (j’ai fait ce choix pour accélérer le modèle, et parce que l’on cherchait à obtenir des tendances plus que des résultats précis). En effet, les nuages ont globalement un effet refroidissant sur le système (cf. figure 10(b)).

## 6 Conclusion

### 6.1 Améliorations possibles

Je suis le premier à avoir véritablement intégré ces codes dans un cadre commun, bien qu’ils existaient déjà séparément. Les résultats présentés dans ce rapport doivent donc être considérés comme préliminaires, et feront l’objet de consolidations ultérieures en vue d’une éventuelle publication.

Plusieurs pistes d’amélioration seront prioritaires d’ici la fin de mon stage, et au-delà. Tout d’abord, les instabilités observées au début des simulations dans le modèle biologique devront être corrigées, car elles provoquent parfois des erreurs d’intégration critiques. J’ai également initié une étude de sensibilité visant à évaluer l’influence de la fréquence d’appel au modèle climatique dans

le couplage 1D. Cependant, les instabilités mentionnées ont compromis une partie des simulations. Leur résolution est donc indispensable, d'autant que la fréquence de couplage semble avoir un impact non négligeable sur l'évolution du système.

Enfin, un des objectifs majeurs de la fin du stage est le lancement d'une première simulation couplée en 3D. À plus long terme, l'intégration d'interactions entre les points de la grille physique lors de couplage 3D constituera une extension naturelle du modèle actuel.

## 6.2 Conclusion générale et apport personnel

L'étude menée au cours de ce stage a permis de confirmer l'hypothèse fondatrice du projet : les méthano-gènes pourraient avoir eu un impact refroidissant sur le climat de Mars à la fin du Noachien.

Par ailleurs, l'analyse du couplage 1D entre les modèles biologique et climatique a constitué une étape préparatoire essentielle aux futures simulations 3D, qui auront vocation à être aussi précises que possible.

Sur le plan personnel, ce stage m'a apporté de nombreuses compétences, tant théoriques (modélisation d'un climat et d'un système biologique, détection et analyse d'exoplanètes grâce aux nombreuses conférences auxquelles j'ai assisté) que techniques (paralléliser des codes, travailler sur un cluster informatique). Il m'a également permis d'améliorer ma méthode scientifique et a contribué à enrichir ma manière d'aborder un problème physique, en m'incitant à prendre davantage de recul. Ce stage a de plus confirmé mon ambition de devenir planétologue, car ce domaine est passionnant et à l'aube de découvertes majeures.

## Remerciements

Je tiens à exprimer ici mes sincères remerciements à toutes les personnes qui m'ont aidé et encadré lors de ce stage. Tout d'abord, je remercie Émeline Bolmont pour m'avoir accueilli au sein de

son équipe et pour ses conseils précieux tout au long du stage. Je souhaiterais également remercier les personnes avec qui j'ai collaboré durant ce stage, en particulier Asena Kuzucan et Boris Sauterey, qui m'ont permis de prendre rapidement et efficacement les modèles en main afin d'effectuer les tâches qui m'ont été confiées.

## Références

- [1] Perron et al. Evidence for an ancient martian ocean in the topography of deformed shorelines. *Nature*, 447(7146) :840–3, 2007.
- [2] Stucky de Quay et al. Prolonged fluvial activity from channel-fan systems on mars. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 124(11) :3119–3139, 2019.
- [3] Pollack et al. The case for a wet, warm climate on early mars. *Icarus*, 71(2) :203–224, 1987.
- [4] Tian et al. Photochemical and climate consequences of sulfur outgassing on early mars. *Earth and Planetary Science Letters*, 295 :412–418, 2010.
- [5] Turbet et al. The environmental effects of very large bolide impacts on early mars explored with a hierarchy of numerical models. *Icarus*, 335 :113419, 2020b.
- [6] Turbet et al. Measurements and semi-empirical calculations of  $\text{CO}_2 + \text{CH}_4$  and  $\text{CO}_2 + \text{H}_2$  collision-induced absorption across a wide range of wavelengths and temperatures. application for the prediction of early mars surface temperature. *Icarus*, 346 :113762, 2020a.
- [7] Wordsworth et al. Transient reducing greenhouse warming on early mars. *Geophysical Research Letters*, 44(2) :665–671, 2017.
- [8] Sauteray et al. Early mars habitability and global cooling by  $\text{H}_2$ -based methanogens. *Nature Astronomy*, 2022.
- [9] Battistuzzi et al. A genomic timescale of prokaryote evolution : insights into the origin of methanogenesis, phototrophy, and the colonization of land. *BMC Evol. Biol.*, 4 :1–14, 2004.
- [10] Leconte. Spectral binning of precomputed correlated-k coefficients. *Astronomy and Astrophysics*, 645 :A20, 2020.
- [11] Turbet et Forget. 3-d global modelling of the early martian climate under a dense  $\text{CO}_2+\text{H}_2$  atmosphere and for a wide range of surface water inventories. *Icarus*, 2021.
- [12] Kharecha et al. A coupled atmosphere–ecosystem model of the early archean earth. *Geobiology*, 3 :53–76, 2005.
- [13] Photochemical model developed by Zahnle and Kasting. <https://github.com/VirtualPlanetaryLaboratory/atmos>.
- [14] Batalha et al. Testing the early mars  $\text{H}_2-\text{CO}_2$  greenhouse hypothesis with a 1-d photochemical model. *Icarus*, 258 :337–349, 2015.
- [15] Codron. Ekman heat transport for slab oceans. *Clim Dyn*, 38 :379–389, 2012.
- [16] Schaefer. Aqueous geochemistry on early mars. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57(19) :4619–4625, 1993.
- [17] Fairén et al. Inhibition of carbonate synthesis in acidic oceans on early mars. *Nature*, 431 :423–426, 2004.
- [18] Toon et al. Rapid calculation of radiative heating rates and photodissociation rates in inhomogeneous multiple scattering atmospheres. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 94(D13) :16287–16301, 1989.
- [19] Gordon et al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database. , 277 :107949, 2022.
- [20] Tennyson et al. The exomol database : Molecular line lists for exoplanet and other hot atmospheres. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 327 :73–94, 2016.
- [21] Planets. Main page — planets. [http://lmdz-forge.lmd.jussieu.fr/mediawiki/Planets/index.php?title=Main\\_Page&oldid=2245](http://lmdz-forge.lmd.jussieu.fr/mediawiki/Planets/index.php?title=Main_Page&oldid=2245), 2024.
- [22] Broecker et Peng. *Tracers in the Sea*. Lamont-Doherty Geological Observatory, New York, 1982.

## Étapes du stage

Dates	Ce qui a été fait
31/03 - 04/04	Travail bibliographique et prise en main du <i>G-PCM</i>
07/04 - 11/04	Prise en main du modèle biologique et implémentation de la première méthode d'intégration du système biologique avec pas de temps variables
14/04 - 17/04	Adaptation du modèle biologique au cas 1D avec une colonne atmosphérique
21/04 - 25/04	Recherche bibliographique et implémentation des premiers flux atmosphériques et à l'interface
28/04 - 02/05	Séparation de l'évolution de l'océan et de l'atmosphère et création d'une grille 2D ( $T, P$ ) de valeurs de concentrations de cellules à l'équilibre
05/05 - 09/05	Ajout d'une troisième dimension à la grille (composition atmosphérique) et prise en main de <code>Exo_k</code> . Premier couplage bio-climatique en 1D
12/05 - 16/05	Création des codes du couplage 3D et lancement du modèle climatique pour atteindre l'état initial d'équilibre
19/05 - 23/05	Discussion autour de l'emplacement des cellules dans l'océan et recherche des bons fichiers topographiques
26/05 - 28/05	Création d'une nouvelle grille plus précise
02/06 - 06/06	Rajout d'une grille de concentrations des espèces chimiques en fonction de $T$ , $P$ et de la composition atmosphérique
16/06 - 20/06	Nouvelle méthode d'intégration du système biologique, disparition des grilles de concentrations
23/06 - 11/07	Travail en cours : réduction des instabilités du modèle biologique et lancement du couplage 3D

TABLE 2 – Évolution du stage et ses principales étapes

# Résumés

## Résumé

La présence d'eau sur Mars à la fin du Noachien suggère un climat chaud possiblement permis, dans le cas d'une atmosphère majoritairement composée de CO<sub>2</sub> et de H<sub>2</sub>, par un effet de serre dû aux interactions collisionnelles entre ces deux espèces. Ce climat pourrait avoir été favorable à l'émergence d'organismes méthanogènes produisant du CH<sub>4</sub> en consommant du H<sub>2</sub>. La baisse de ce dernier aurait ensuite conduit à un refroidissement de la planète. Pour explorer cette rétroaction bioclimatique, un modèle biologique a été couplé à des modèles climatiques 1D ou 3D. Les résultats en 1D montrent un refroidissement global aboutissant à la congélation de l'océan, arrêtant ainsi l'activité biologique. Une étude de sensibilité confirme la robustesse du résultat vis-à-vis du volume océanique et du volume occupé par les cellules. Des simulations 3D sont en cours pour affiner ces conclusions dans un cadre spatialement résolu.

## Abstract

The presence of surface water on Mars at the end of the Noachian suggests a warm climate, possibly sustained—under a CO<sub>2</sub>- and H<sub>2</sub>-dominated atmosphere—by a greenhouse effect driven by collision-induced absorption between these two gases. Such conditions may have been favorable to the emergence of methanogenic microorganisms, which produce CH<sub>4</sub> by consuming H<sub>2</sub>. The resulting decrease in H<sub>2</sub> could have led to a global cooling of the planet. To investigate this bioclimatic feedback, a biological model was coupled with 1D and 3D climate models. The 1D simulations show a global temperature drop leading to ocean freezing and cessation of biological activity. A sensitivity analysis confirms the robustness of this outcome with respect to ocean volume and cell density. Ongoing 3D simulations aim to refine these conclusions in a spatially resolved framework.

## Annexes

### A Modèle de la couche limite stagnante

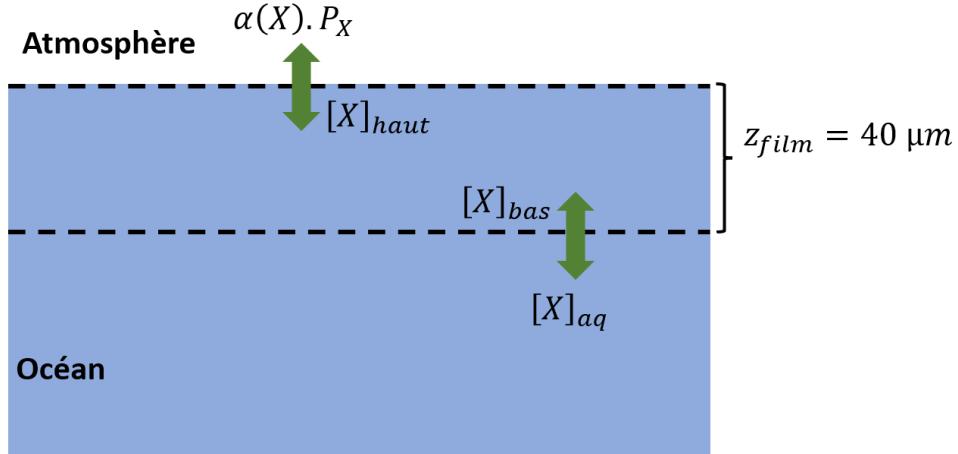


FIGURE 11 – Modèle de la couche limite stagnante. Le flux du gaz  $X$  à travers l’interface atmosphère-océan est égal au produit de sa vitesse piston  $v_p(X) = K_{\text{diffusion}}(X)/z_{\text{film}}$  et du gradient de concentration entre le haut et le bas de la couche limite  $[X]_{\text{haut}} - [X]_{\text{bas}}$ .

Le modèle de la couche limite stagnante consiste à considérer qu’il existe une fine couche à la surface de l’océan à travers laquelle le gaz peut passer par diffusion [12]. L’épaisseur de la couche limite  $z_{\text{film}}$  est déterminée de façon empirique (cf. Broecker et Peng, 1982 [22]). Dans ce modèle, les taux de passage des gaz d’un milieu vers l’autre sont limités par leurs vitesses piston respectives. Cette dernière correspond à la vitesse à laquelle un gaz dissous sortira de la colonne d’eau par l’action d’un piston s’éllevant à une vitesse constante.

Dans cette approche, le flux du gaz  $X$  à travers l’interface atmosphère-océan est égal au produit de sa vitesse piston et du gradient de concentration entre le haut et le bas de la couche limite  $[X]_{\text{haut}} - [X]_{\text{bas}}$  (cf. figure 11). De plus, on considère que le sommet de la couche limite est à l’équilibre de Henry avec l’atmosphère, *ie*  $[X]_{\text{haut}} = \alpha(X) \cdot P_X$ , tandis que le bas est à l’équilibre avec la concentration de l’océan  $[X]_{\text{aq}}$ .

Finalement, le flux à l’interface atmosphère-océan est donné par

$$\Phi(X) = v_p(X) \cdot (\alpha(X) \cdot P_X - [X]_{\text{aq}}) \cdot C \quad (7)$$

où

- $\Phi(X)$  est le flux à l’interface (molécules/cm<sup>2</sup>/s)
- $v_p(X) = K_{\text{diffusion}}(X)/z_{\text{film}}$  est la vitesse piston de l’espèce  $X$  (en cm/s),  $K_{\text{diffusion}}(X)$  est le diffusivité thermique de  $X$ ,  $z_{\text{film}} = 40\mu\text{m}$
- $\alpha(X)$  est la solubilité de  $X$  (en mol/L/bar)
- $P_X$  est la pression partielle de  $X$  à la surface (en bar)
- $[X]_{\text{aq}}$  est la concentration de  $X$  dans l’océan (en mol/L)
- et  $C = 6,02 \cdot 10^{20}$  molécules.cm<sup>-3</sup>.mol<sup>-1</sup>.L est une constante de conversion des unités.

Les valeurs de  $\alpha(X)$ , de  $K_{\text{diffusion}}(X)$ , de  $v_p(X)$  et de  $z_{\text{film}}$  sont issues majoritairement de l'article de Karecha et al. (2005) [12]. Les valeurs utilisées dans cette étude sont données dans le tableau 3

Gaz	Solubilité $\alpha(X)$ en mol/L/bar	Vitesse piston $v_p(X)$ en cm/s
H <sub>2</sub>	$7,8 \times 10^{-4}$	$1,3 \times 10^{-2}$
CO <sub>2</sub>	$\alpha_{\text{CO}_2}(T)$	$4,8 \times 10^{-3}$
CH <sub>4</sub>	$1,4 \times 10^{-3}$	$4,5 \times 10^{-3}$
N <sub>2</sub>	$7,0 \times 10^{-4}$	$4,8 \times 10^{-3}$

TABLE 3 – Solubilités et vitesses pistons des quatre gaz d'intérêt.

La solubilité du CO<sub>2</sub> dépend de la température selon l'expression

$$\alpha_{\text{CO}_2}(T) = \exp \left( \frac{9345.17}{T} - 167.8108 + 23.3585 \ln T + (0.023517 - 2.3656 \times 10^{-4}T + 4.7036 \times 10^{-7}T^2) \times 35.0 \right) \quad (8)$$

La courbe correspondante est tracée en figure 12.

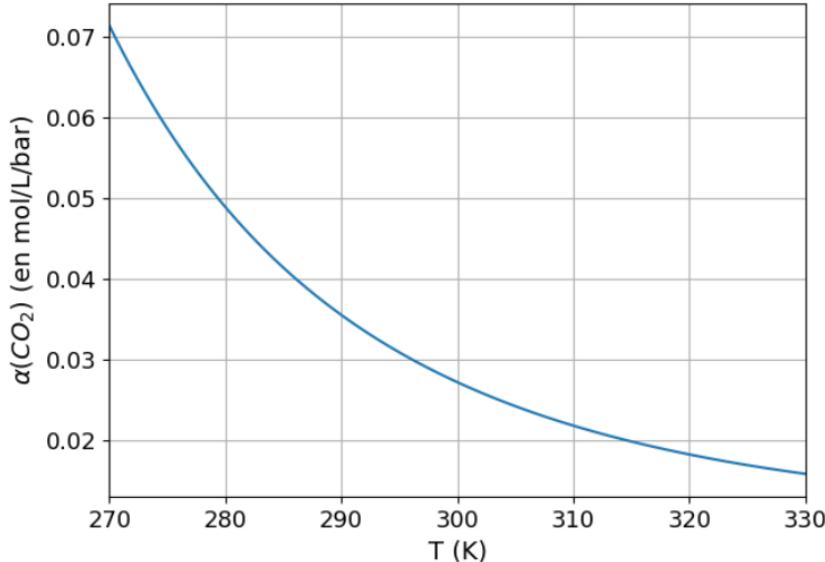


FIGURE 12 – Solubilité du CO<sub>2</sub>  $\alpha_{\text{CO}_2}$  en fonction de la température  $T$ .

## B Relief de Mars avant le True Polar Wander

La topographie complexe de Mars résulte d'une histoire géologique dynamique, marquée notamment par le *True Polar Wander* (TPW) — un déplacement de l'axe de rotation par rapport à la croûte rigide. Contrairement à la précession, le TPW implique une rotation de l'enveloppe externe de la planète autour du manteau pour rééquilibrer les masses, généralement à cause d'accumulations massives (volcans, calottes glaciaires).

Des indices suggèrent qu'un TPW s'est produit après la formation de certains reliefs. Reconstituer la topographie pré-TPW permet d'identifier les anciens pôles, équateurs et zones climatiques. Ce basculement a déplacé les calottes polaires, modifié les réseaux fluviaux et influencé la répartition des glaces et sédiments martiens.

Il y a probablement eu plusieurs TPW au cours de l'histoire de Mars, mais pour cette étude j'utilise le relief de Mars avant le TPW majeur qui a eu lieu au cours de l'Hespérien (-3,7 à -3 milliards d'années).

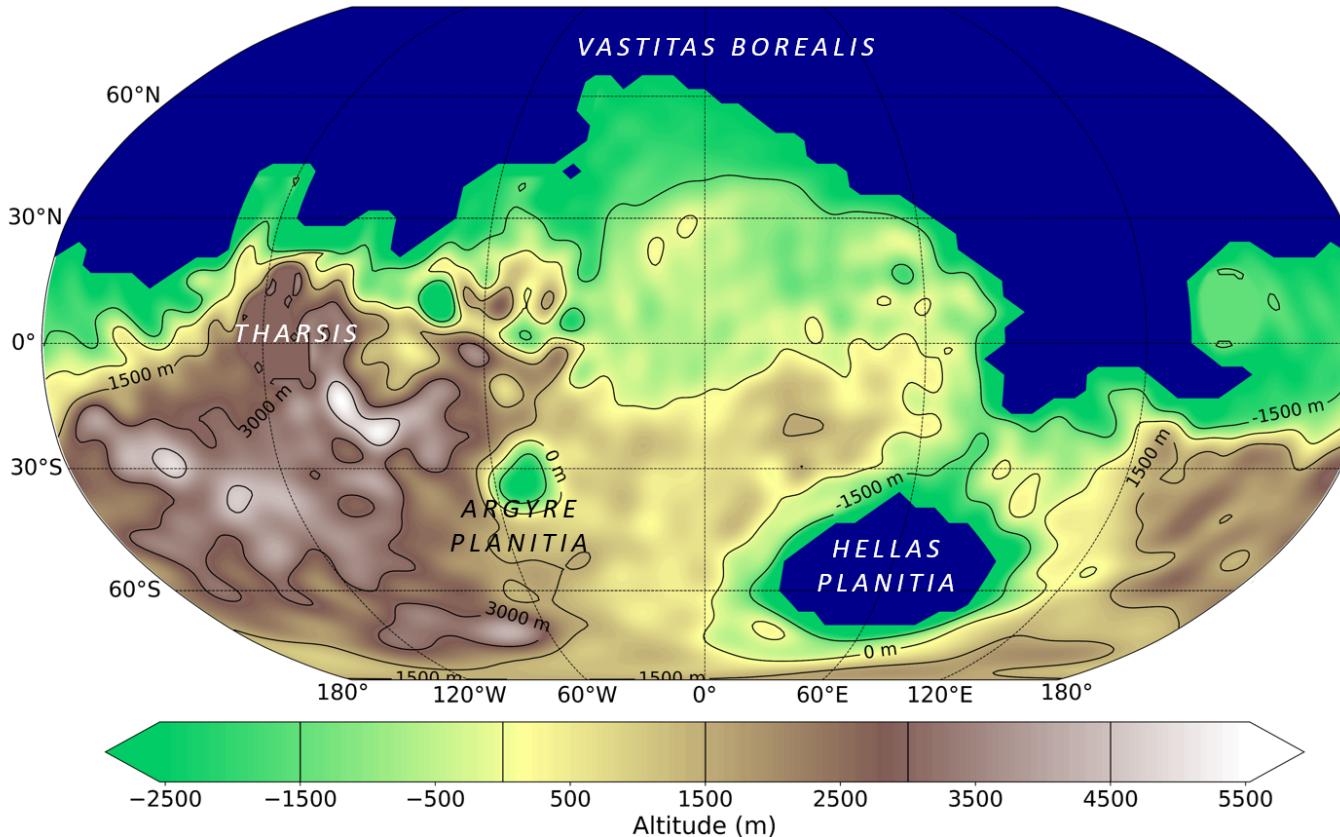


FIGURE 13 – Relief de Mars avant le TPW de l'Hespérien. En bleu apparaît l'océan tel qu'il est dans le modèle utilisé ici [11], avec une surface à  $-2.54\text{km}$  et correspondant à une couche globale équivalente (GEL) de 550m.

## C Lacs à la surface de Mars

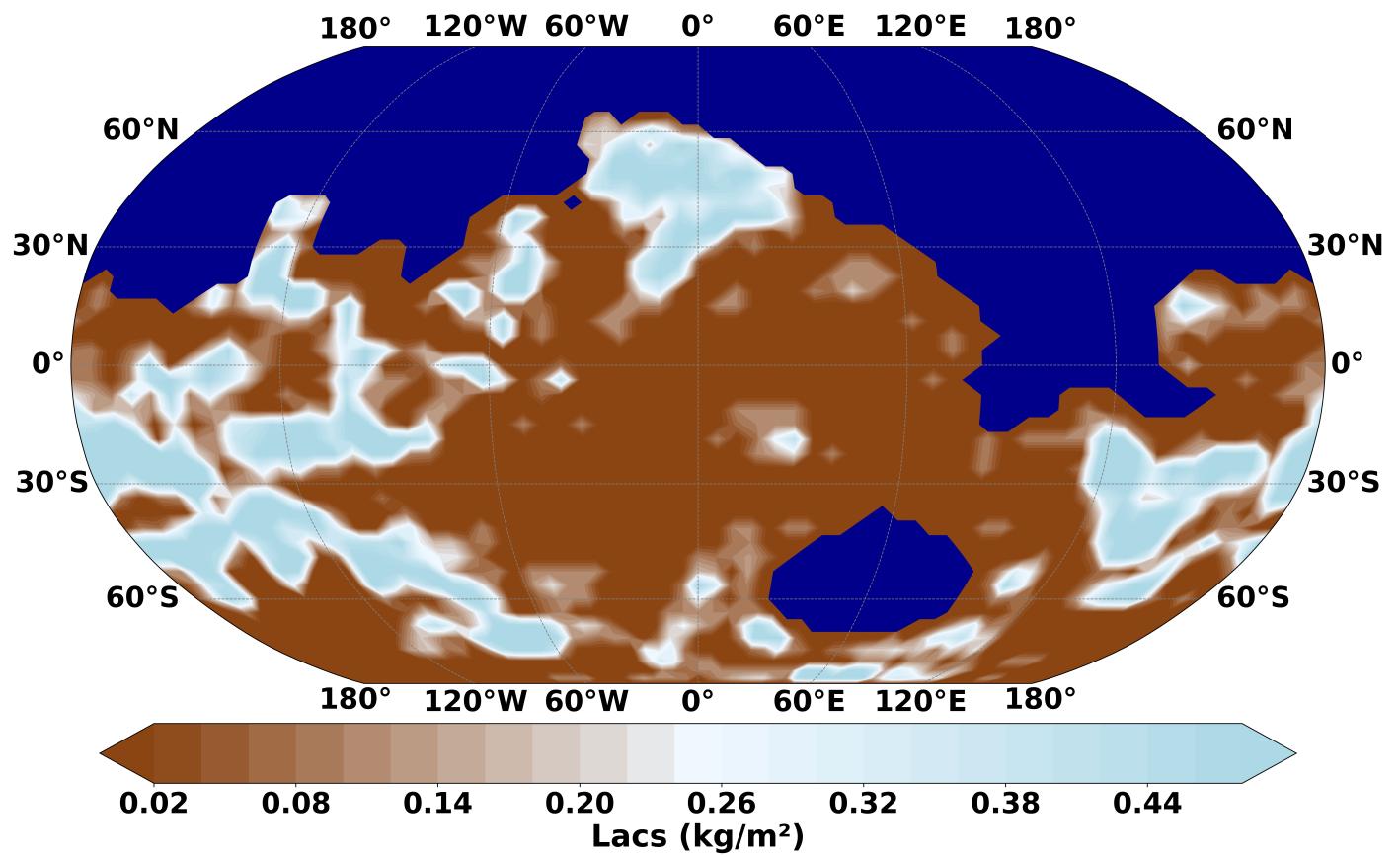


FIGURE 14 – Lacs à la surface de Mars dans l'état initial du système, *i.e.* sans biologie. Ces données sont issues du modèle climatique 3D LMDZ.

## D Génération des tables d'absorption par Exo\_k

En plus de calculer l'équilibre radiatif d'une atmosphère, une des grandes forces du modèle Exo\_k est aussi de générer des tables d'absorption correspondant à une composition d'atmosphère donnée, en prenant en compte la pression et les ratios des différents gaz.

Les paragraphes qui suivent expliquent comment sont créées ces tables dans le cas 3D avec une proportion variable de H<sub>2</sub>O dans l'atmosphère. La manière de construire ces tables dans le cas 1D est très similaire et est faite de manière autonome par Exo\_k (on a considéré une atmosphère sèche en 1D, donc l'eau n'est pas ajoutée au modèle dans ce cas). Dans les deux cas, l'absorption du N<sub>2</sub> est considérée comme négligeable et n'est pas prise en compte. Une fois ces tables d'absorption créées, il reste à inclure l'effet des CIA, ce qui est directement fait par le modèle et ne sera pas présenté ici.

Les tables de sections efficaces d'absorption peuvent être trouvées pour l'immense majorité des espèces sur des bases de données comme HITRAN [19] ou ExoMol [20]. Ici, elles sont issues de HITRAN.

Tout d'abord, il faut les charger dans une classe

```
1 import exo_k as xk
2 k_db = xk.Kdatabase(['CO2', 'CH4', 'H2O'], '')
```

puis on réduit la résolution de ces données pour augmenter la vitesse de calcul du modèle. Il est possible de prendre des résolutions différentes en fonction des longueurs d'ondes. Ici on prend l'infrarouge (IR) de 40 à 4000 cm<sup>-1</sup> et le visible (VI) de 2000 à 25000 cm<sup>-1</sup>. Si les tables ne couvrent pas la totalité de ces longueurs d'ondes, alors le spectre est étendu avec une valeur proche de zéro. Cela est illustré par la figure 15.

```
1 Res = 8.5
2 wn_grid_IR = xk.wavenumber_grid_R(40., 4000., Res)
3
4 Res2 = 13.5
5 wn_grid_VI = xk.wavenumber_grid_R(2000., 25000., Res2)
6
7 k_db_IR = k_db.bin_down_cp(wnedges=wn_grid_IR, remove_zeros=True)
8 k_db_VI = k_db.bin_down_cp(wnedges=wn_grid_VI, remove_zeros=True)
```

Il n'existe pas directement de base d'absorption pour H<sub>2</sub>. Cependant, la table de H<sub>2</sub>O a été construite avec un fond de H<sub>2</sub>. En prenant une concentration très faible de vapeur d'eau pour cette base, on retrouve l'absorption du H<sub>2</sub>

```
1 # Creating the ktable for H2 only no H2O
2 # IR
3 #Loading H2O corrk table
4 molecs3=['H2O']
5 suffix3='IR_LR.ktable.exorem_SI.h5'
6 database3=xk.Kdatabase(molecs3,suffix3, search_path = datapath_LR)
7 #Gaz composition
8 composition={'H2O':1e-50}
9 #Creating corrk table for a gaz with the given composition
10 H2_IR_ktable=database3.create_mix_ktable(composition)
11 H2_IR_ktable.write_hdf5(datapath_LR+ 'H2_IR_LR.ktable.exorem_SI')
```

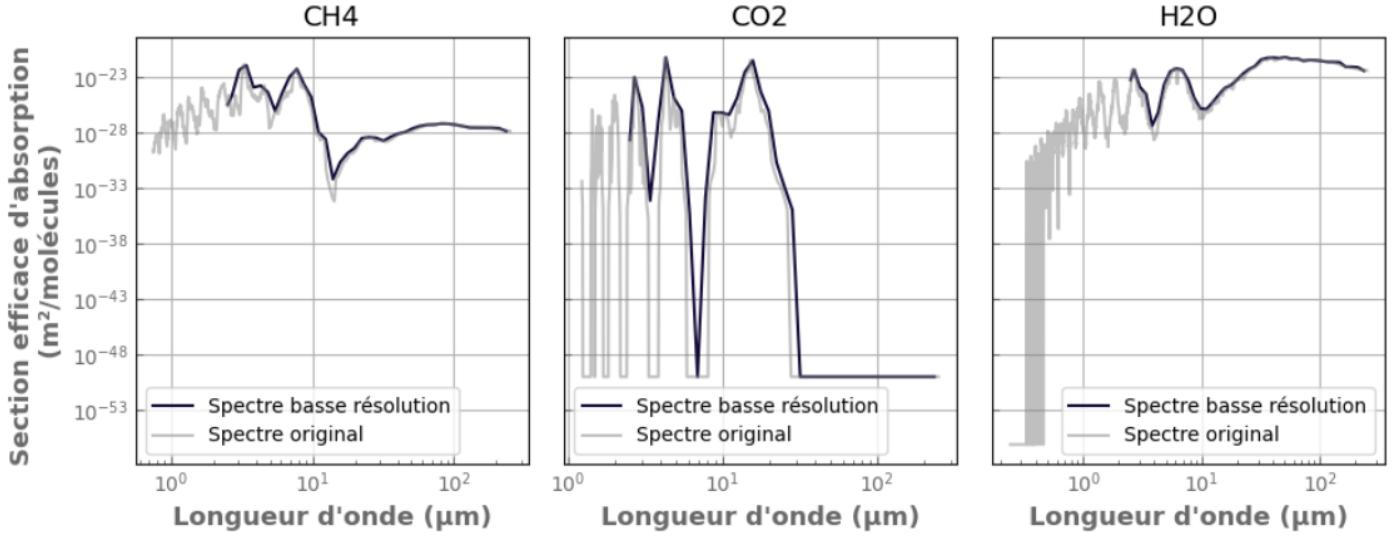


FIGURE 15 – Comparaison entre les spectres originaux et les spectres à basse résolution de  $\text{H}_2\text{O}$ , de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{CH}_4$  dans l’IR, pour  $P = 2$  bars et  $T = 300\text{K}$ . Les zones où ils sont plats correspondent aux zones où le spectre a été étendu.

```

12 H2_IR_ktable=xk.Ktable(filename=datapath_LR+'H2_IR_LR.ktable.exorem_SI.h5',
13     remove_zeros=True)
14
15 # VI range
16 molecs4=['H2O']
17 suffix4='VI_LR.ktable.exorem_SI.h5'
18 database4=xk.Kdatabase(molecs4,suffix4, search_path = datapath_LR)
19 composition={'H2O':1e-50}
20 H2_VI_ktable=database4.create_mix_ktable(composition)
21 H2_VI_ktable.write_hdf5(datapath_LR + 'H2_VI_LR.ktable.exorem_SI')
22 H2_VI_ktable=xk.Ktable(filename=datapath_LR+'H2_VI_LR.ktable.exorem_SI.h5',
23     remove_zeros=True)
```

Il reste ensuite à créer la table pour des fractions fixées de gaz et une fraction variable de vapeur d’eau. Lors des couplages 1D et 3D, cela est fait avant chaque appel au modèle climatique puisque la composition de l’atmosphère évolue d’un appel à l’autre sous l’effet des méthaneogènes.

```

1 #IR range
2 #Loading useful corrk tables (low resolution)
3 molecs5=['CO2','CH4','H2','H2O']
4 suffix5='IR_LR.ktable.exorem_SI.h5'
5 database5=xk.Kdatabase(molecs5,suffix5,search_path = datapath_LR)
6 #Defining variable H2O ratios
7 x_array=np.array([1e-50,1.e-7,1.e-6, 1.e-5, 1.e-4, 1.e-3, 1.e-2])
8 #Mix gaz composition
9 vgas5={'H2O':'background'}
10 bg_gas5={'CO2':fC,'N2':'background','CH4':fG,'H2':fH}
11 #Creating the mixed corrk table
12 mix_var_gas5_IR=database5.create_mix_ktable5d(vgas_comp=vgas5,bg_comp=bg_gas5,
```

```

13     x_array=x_array)
14
15 #VI range
16 molecs6=['CO2','CH4','H2','H2O']
17 suffix6='VI_LR.ktable.exorem.SI.h5'
18 database6=xk.Kdatabase(molecs6,suffix6,search_path = datapath_LR)
19 x_array=np.array([1e-50,1.e-7,1.e-6, 1.e-5, 1.e-4, 1.e-3, 1.e-2])
20 vgas6={'H2O':'background'}
21 bg_gas6={'CO2':fC,'N2':'background','CH4':fG,'H2':fH}
22 mix_var_gas6_VI=database6.create_mix_ktable5d(vgas_comp=vgas6, bg_comp=bg_gas6,
23     x_array=x_array)

```

Les spectres individuels et finaux sont affichés en figure 16 à titre d'illustration dans le cas où  $P = 2$  bars et  $T = 300\text{K}$ . Pour plus de précisions, se référer à la documentation de Exo\_k : [https://perso.astrophys.u-bordeaux.fr/~jleconte/exo\\_k-doc/](https://perso.astrophys.u-bordeaux.fr/~jleconte/exo_k-doc/).

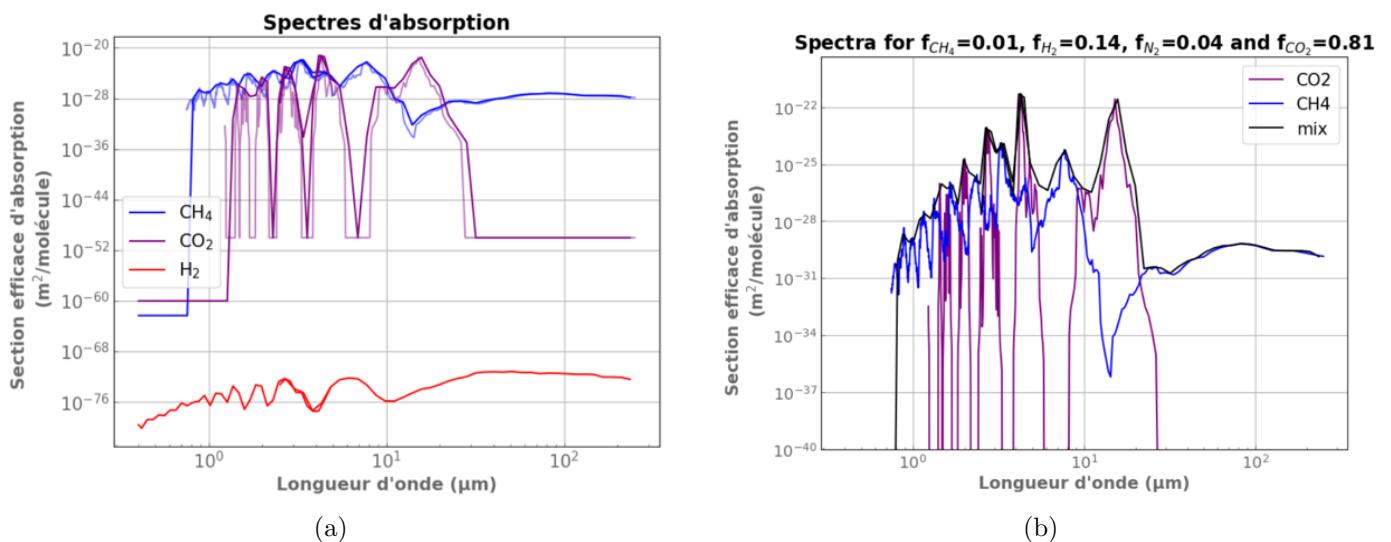


FIGURE 16 – (a) Spectres d'absorption des molécules d'intérêts du proche UV au proche IR. Au vu du spectre du  $H_2$ , on peut également le considérer comme inactif du point de vue de l'absorption. Pour chacune des courbes, la couleur pâle correspond au spectre original et la couleur foncée au spectre à basse résolution utilisé pour augmenter l'efficacité des calculs. (b) Spectre d'une atmosphère composée de 81% de  $CO_2$ , 14% de  $H_2$ , 4% de  $N_2$  et 1% de  $CH_4$  en noir. En bleu et en violet, les contributions respectives du  $CH_4$  et du  $CO_2$  au spectre.

## E Schéma du GCM

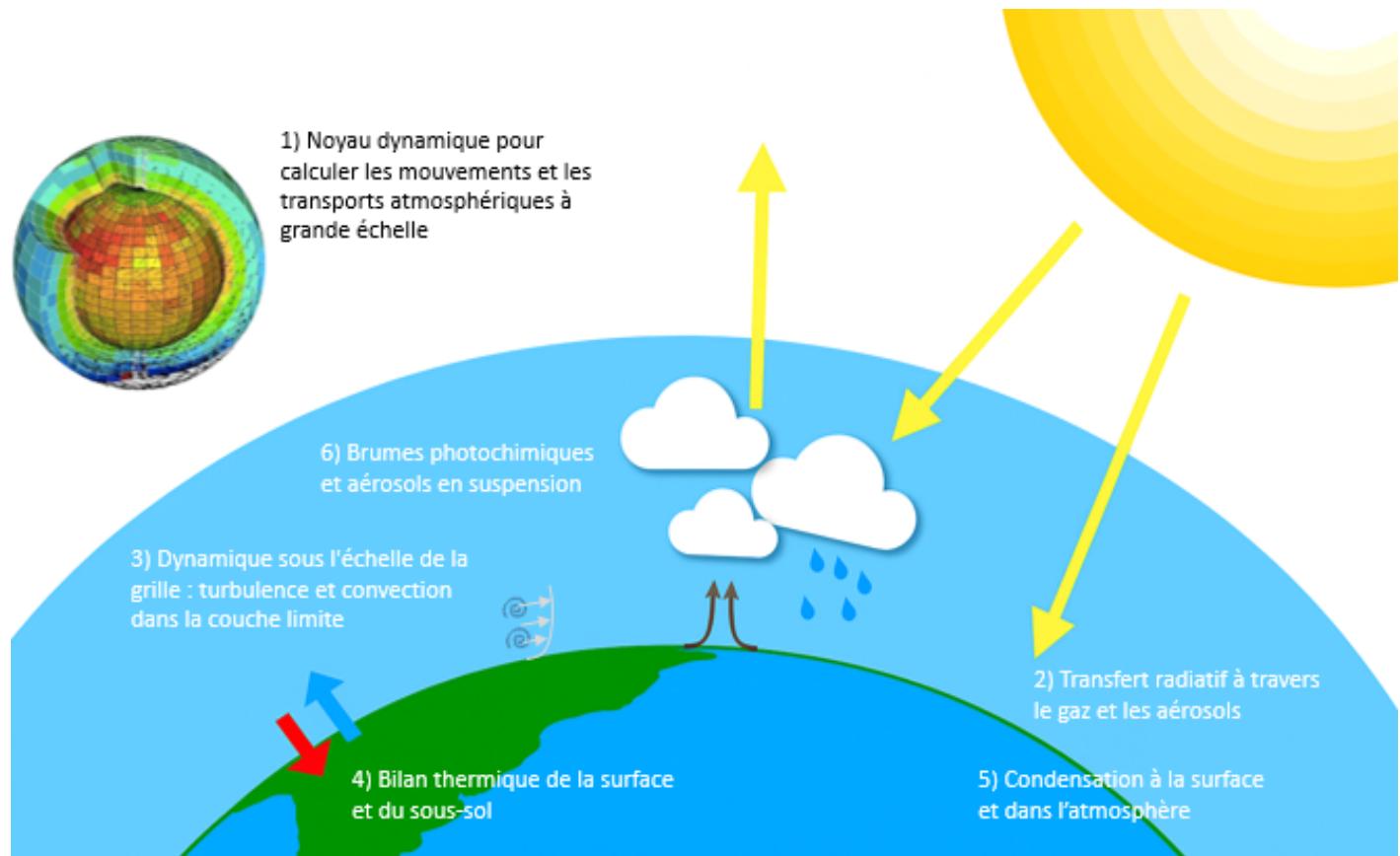


FIGURE 17 – Schéma explicatif des différents processus inclus dans le G-PCM. Figure de E. Bolmont.

## F Dépendance du modèle biologique en fonction de $r$

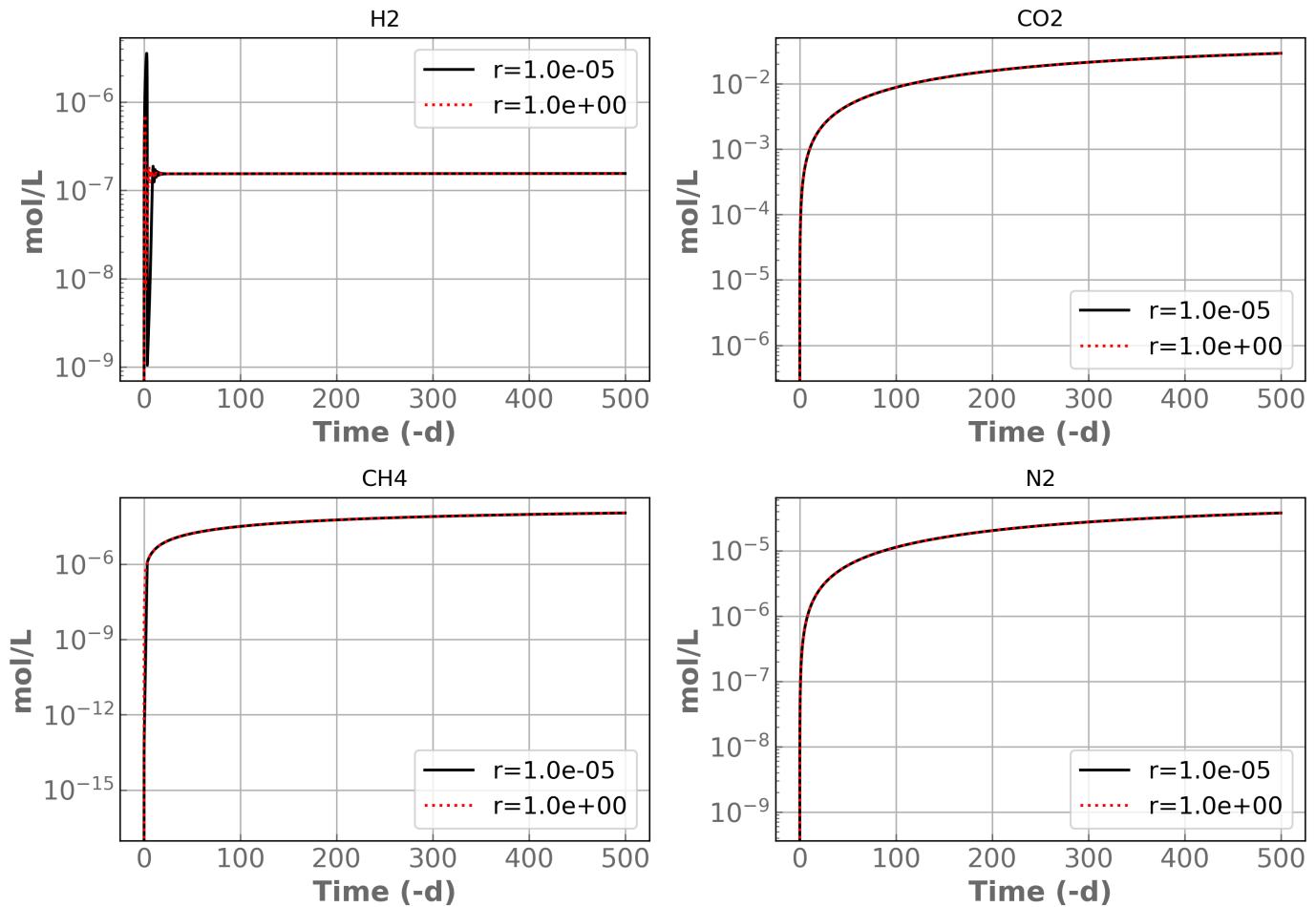


FIGURE 18 – Dépendance des concentrations en H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> dans l'océan en fonction de la valeur de  $r = V_{\text{cellules}}/V_{\text{océan}}$ . Il apparaît que les concentrations évoluent strictement similairement, ce qui est cohérent avec le fait que le nombre de cellules soit constant en fonction de  $r$ .

$P = 2$  bars,  $T = 300$ K et  $f_{\text{CH}_4} = 0$

## G Dépendance du modèle biologique en fonction de $V_{\text{ocean}}$

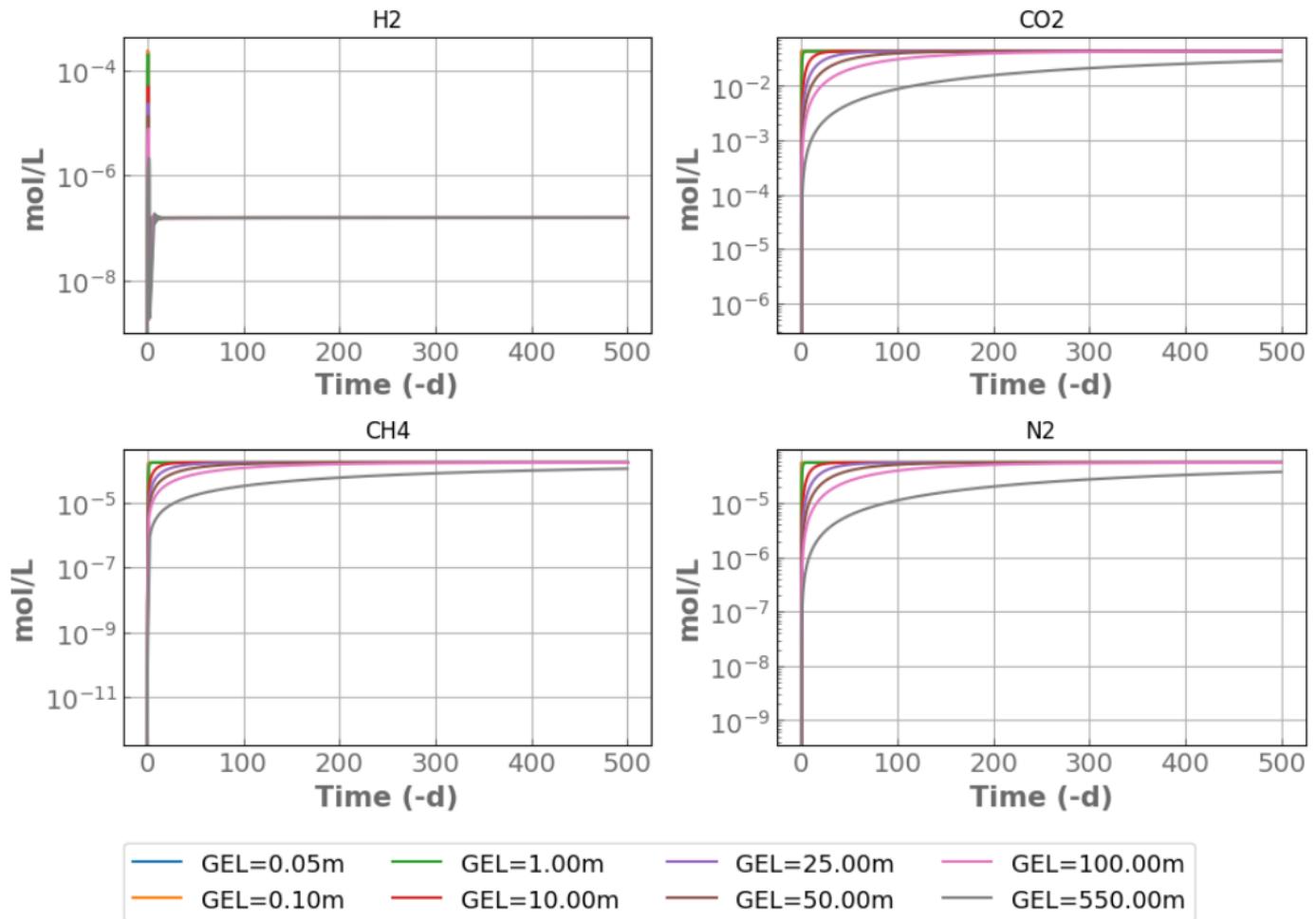


FIGURE 19 – Évolution temporelle des concentrations de H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> dans l'océan pour  $P = 2$  bars,  $T = 300\text{K}$  et  $f_{\text{CH}_4} = 0$ . Comme le nombre cellules est constant, les concentrations tendent vers la même valeur quelle que soit la valeur de la GEL.

## H Forçage radiatif des nuages

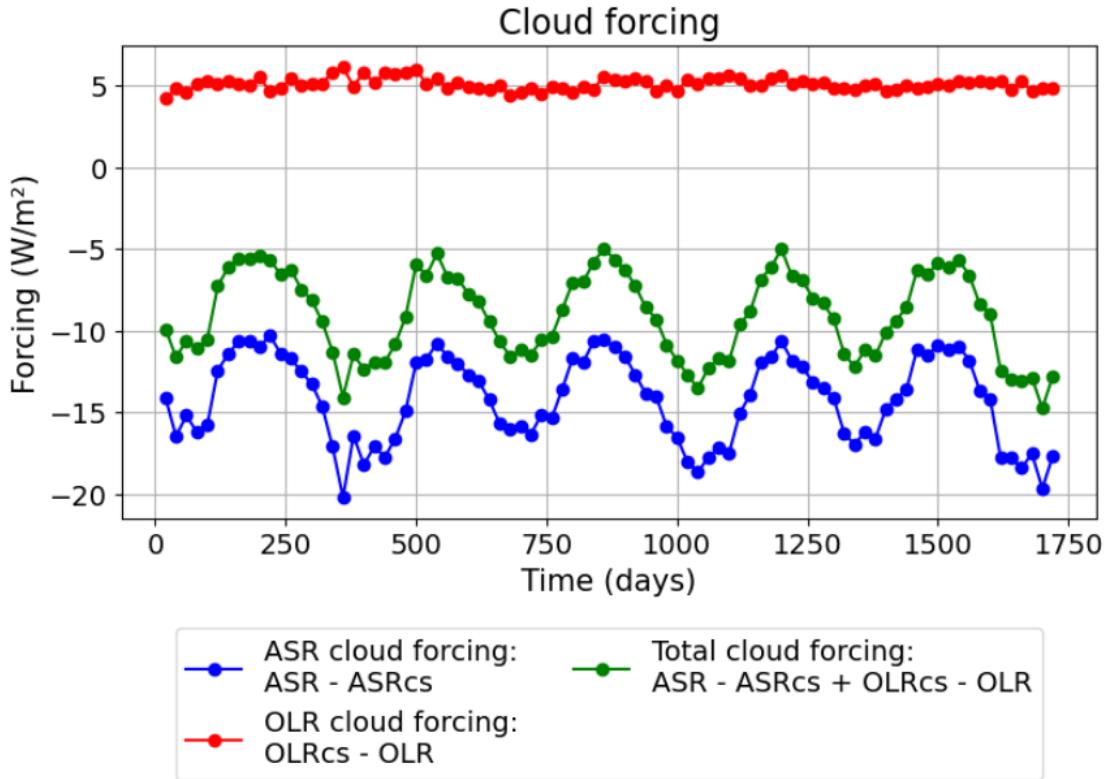


FIGURE 20 – Forçage radiatif des nuages dans le GCM. En rouge l’effet de serre des nuages, en bleu leur effet parasol. En vert est tracé le forçage total. Il est négatif, les nuages refroidissent donc la planète.

Les nuages jouent un rôle crucial dans le bilan radiatif de Mars, en affectant à la fois le rayonnement solaire absorbé et le rayonnement infrarouge sortant. L’ASR (*Absorbed Shortwave Radiation*) représente la quantité de rayonnement solaire absorbé par le système Terre-atmosphère, tandis que l’OLR (*Outgoing Longwave Radiation*) correspond au rayonnement infrarouge émis par le sommet de l’atmosphère vers l’espace. En présence de nuages, on observe ici que  $OLR_{cs} - OLR > 0$  (cf. figure 20), ce qui reflète le fait que les nuages piègent une partie du rayonnement infrarouge, réduisant ainsi le flux sortant : c’est un effet de serre. En parallèle,  $ASR - ASR_{cs} < 0$ , les nuages réfléchissant une partie du rayonnement solaire incident, ce qui diminue l’énergie absorbée par le système : c’est un effet parasol. La somme de ces deux contributions est négative, indiquant que, dans l’ensemble, les nuages exercent un effet refroidissant net sur le climat martien (cf. figure 21).

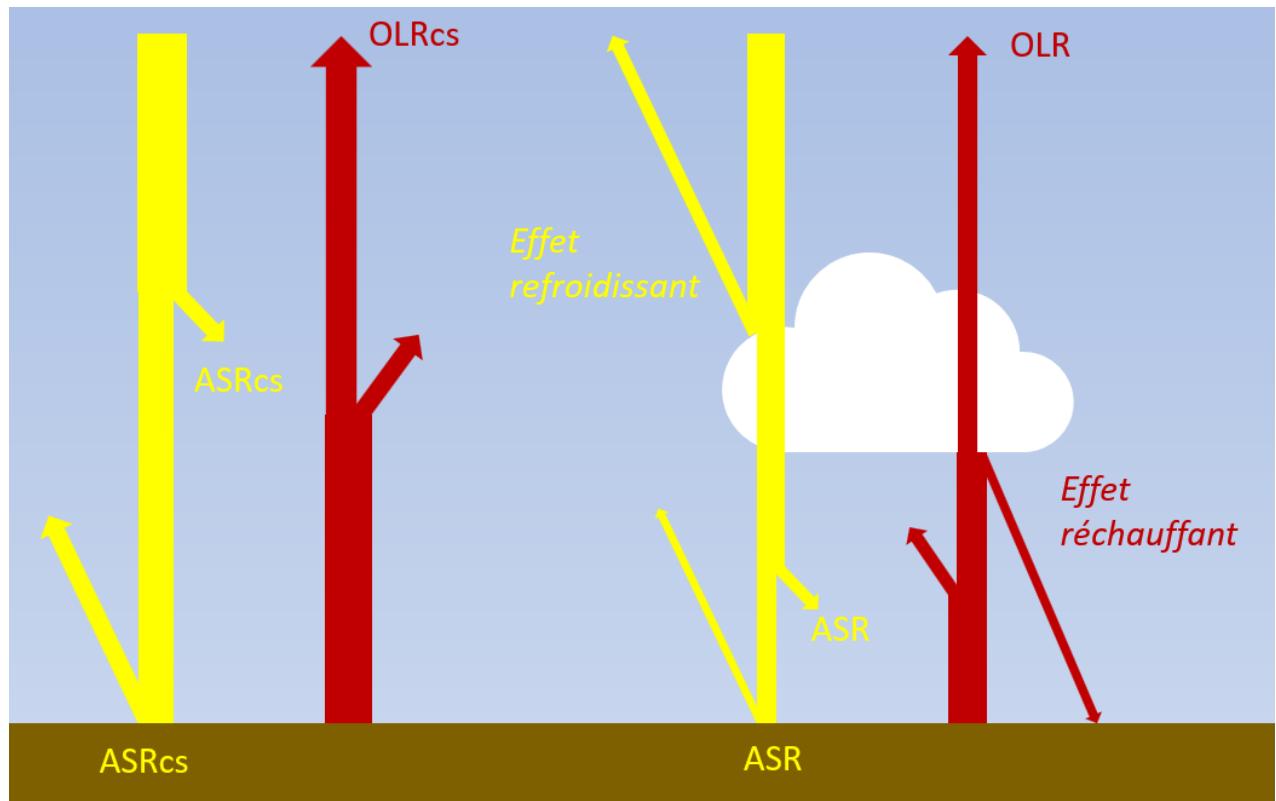


FIGURE 21 – Schéma du forçage radiatif des nuages dans le GCM. Ici l'effet global est refroidissant car l'effet parasol est supérieur à l'effet de serre.