



MANUAL SOBRE ESTIMACIÓ DEL METABOLISME A LES LLACUNES COSTANERES DEL BAIX TER

GENER 2023



INYTEL

COORDINADORS:
MARIA BAS SILVESTRE
ÀNGEL LITAGO FALCES



Generalitat
de Catalunya



Diputació de Girona



Unió Europea
Fons europeu
de desenvolupament regional



Girona, regió sensible a l'aigua



CÀTEDRA
D'ECOSISTEMES
LITORALS
MEDITERRANIS



Universitat
de Girona



Museu de la
Mediterrània



Ajuntament de
Torroella de Montgrí



Diputació de Girona



Ajuntament de Girona

Universitat de Girona
Consell Social



Universitat de Girona
Institut d'Ecologia Aquàtica

En el context del projecte PECT es presenta aquest manual en el que es proporciona informació sobre què és el metabolisme ecosistèmic i perquè pot resultar d'utilitat en el seguiment ecològic d'un sistema aquàtic i quin software, material i dades són necessaris per calcular-lo.

Taula de continguts

1. Metabolisme ecosistèmic: definició, mesures, paràmetres i utilitat des de una perspectiva ecològica.....	1
2. Model d'estimació del metabolisme: 'the <i>BASE model</i> '	1
3. Variables fisicoquímiques implicades, dades necessàries i sondes de mesura	7
4. Procediment al camp	9
4.1. Instal·lació i mesures.....	9
4.1.2. Sondes exteriors.....	9
4.1.3. Sondes submergides	10
4.2. Neteja i calibratge	10
4.3. Comprovació funcionament correcte i bateries.....	11
4.4. Obtenció de les dades.....	11
5. Format de la base de dades per al model.....	12
6. Anàlisi dels resultats.....	13
7. Càlculs complementaris: taxes metabòliques estandarditzades.....	15
8. Paràmetres útils per la mesura de l'estat ecològic: avantatges e inconvenients del seu ús.	16
9. Conclusions finals	17
10. Bibliografia i fonts de consulta suplementàries	17
11. Annex	18
11.1. <i>SCRIPT</i> 1 BASE	18
11.2. <i>SCRIPT</i> 2 BASE	29
11.3. <i>SCRIPT</i> CORRECCIÓ D'OXIGEN DISSOLT	33
11.4. <i>SCRIPT</i> Càlcul taxes metabòliques estandarditzades.....	37
11.5. <i>SCRIPT</i> Gràfiques dinàmiques	39
11.6. <i>SCRIPT</i> Interpolació	41
11.7. Treball FI de Grau	42
11.8. Sondes i manuals d'ús.....	42
11.9. Validació i selecció del model.....	44
11.10. Validació i selecció del model mitjançant gràfiques	45
11.11. Exemple base de dades per utilitzar el model base (<i>INPUT</i>).....	48
11.12. Exemple resultats del model base (<i>OUTPUT</i>)	49
11.13. (Fotografies) - Exemples i detalls d'instal·lació i mostreig	51

1. Metabolisme ecosistèmic: definició, mesures, paràmetres i utilitat des de una perspectiva ecològica.

L'estimació del metabolisme ecosistèmic recull informació sobre el balanç entre les principals vies del carboni, producció primària i respiració, tant a nivell individual com de l'ecosistema. Així, el metabolisme es considera un descriptor integratiu fonamental sobre el funcionament dels ecosistemes aquàtics. En termes generals, pot expressar-se utilitzant diferents taxes metabòliques:

- GPP, abreviació per a *Gross Primary Production* o Producció Primària Bruta, correspon a la producció autòtrofa total de carboni orgànic mitjançant la fixació de CO₂.
- ER, abreviació per a *Ecosystem Respiration* o Respiració Ecosistèmica, expressa la remineralització de carboni orgànic a CO₂ per tots els organismes de l'ecosistema.
- NEP, abreviació per a *Net Ecosystem Production* o Producció Ecosistèmica Neta, resultat de la diferència entre la GPP i la ER. El valor d'aquesta taxa o paràmetre pot ser negatiu, si $GPP < ER$, el que indicaria que el sistema respira més que produeix (heteròtrof), o positiu, si la $GPP > ER$, el que indicaria que la producció en el sistema supera la respiració (autòtrof).

Aquestes taxes metabòliques es poden mesurar en termes de canvis en qualsevol reactiu o metabòlit que estigui implicat de manera constant en la producció primària i la respiració (com ara l'oxigen). Encara que hi ha nombrosos i variats mètodes per l'estima del metabolisme, en els últims anys els avanços en la tecnologia han permès que models, com ara el d'Odum (1956), basat en els canvis en la concentració d'oxigen dissolt, es tornin cada cop més acurats, i a l'hora, més assequibles, per a la mesura del metabolisme ecosistèmic. Així, són cada cop més els estudis que inclouen aquesta tècnica basada en la mesura, per part d'una sonda o d'un conjunt de sondes, dels canvis en la concentració d'oxigen, en alta freqüència, tenint en compte les possibles variacions abiòtiques en la columna d'aigua.

En aquest manual, es proporciona informació sobre la estima del metabolisme en llacunes costaneres fent servir la tècnica de l'oxigen, coneguda en anglès com a *free-water DO (dissolved oxygen) methodology* (Staeher et al., 2010, 2012) i l'estimació de les taxes metabòliques a partir de l'ajustament d'un model bayesià (Grace et al., 2015; Giling et al., 2017).

D'acord amb la generalització i ús de les tècniques per a la estima del metabolisme a nivell d'ecosistema, aquest s'ha convertit en una eina fonamental de *monitoring* en els sistemes aquàtics, tenint interès ja no per la seua pròpia oscil·lació sinó per la seua relació i variació amb altres factors físics, químics i/o biològics com ara la variació hídrica d'un sistema, *blooms* d'alguns organismes d'interès, pujades de les temperatures, etc. Aquestes aplicacions de tipus més ecològic obtenen una importància crucial en els tipus d'escenaris que vivim i que es preveuen per als propers anys com ara l'escenari de canvi climàtic, d'impactes ambientals, etc. Saber com respon, en continu, un ecosistema davant alguns dels canvis que es preveuen resulta fonamental per saber com promoure la protecció i conservació de sistemes tan importants com fràgils.

2. Model d'estimació del metabolisme: 'the BASE model'

El *software* que es presenta en aquest manual correspon a un model que inicialment va ser creat pel càlcul del metabolisme ecosistèmic en rius basat en l'estima de l'oxigen per Grace et al. (2015)

però que ha sigut modificat per a la seua possible aplicació sobre dades de llacunes (Bas-Silvestre et al., 2020) com ara les que es treballen i monitoritzen dintre del projecte PECT.

En principi, l'aplicació d'aquest model sobre aquests sistemes aquàtics requereix d'una sèrie d'assumpcions, especialment si només es col·loca un conjunt de sondes per llacuna i en superfície. Assumpcions com ara la pressuposició de que el sistema es troba ben barrejat, per tant, no estratificat i amb poca variació de variables físiques, químiques o biològiques en l'horitzontal.

Encara que el model original BASE ha patit diverses modificacions i millores des de que va ser llençat en 2015 (Grace et al., 2015) les modificacions per l'aplicació a llacunes van ser realitzades sobre la versió BASE v2.3 (gener de 2018) per Bas-Silvestre et al., 2020, que va ser l'última actualització del *software* abans de la creació d'un *package* específic. Així que, si s'han inclòs millores en el *software* posteriors a aquesta versió, no han pogut ser contemplades en la versió que sí es pot aplicar a les llacunes.

La fórmula i les distintes variables implicades en que es basa el model BASE són:

$$[DO]_{t+1} = [DO]_t + AI_t^p - ER_{\bar{T}} (\Theta^{T_t - \bar{T}}) - k_t \frac{(DO_{eq_t} - DO_t)}{Z_{mix}} \pm Adv$$

On $[DO_t]$ i $[DO_{t+1}]$ corresponen als canvis en la concentració d'oxigen dissolt entre intervals de temps consecutius. El subíndex t indica l'interval de temps, en el cas del PECT, 10 minuts, com s'especifica després. GPP queda expressat com AI_t^p , on A és una contant diària que representa la producció primària per quàntum de llum (és a dir, l'eficiència fotosintètica), I correspon a la radiació fotosintèticament activa (rang de freqüència 400-700 nm, en $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) i l'exponent p és el coeficient que reflecteix l'habilitat dels productors primaris per utilitzar la energia lumínica incident (Grace et al., 2015). El terme $ER_{\bar{T}} (\Theta^{T_t - \bar{T}})$ correspon a la taxa de respiració amb la termodependència d'Arrhenius ($ER_{\bar{T}}$), on Θ (*theta*) és el coeficient de la dependència de la temperatura, T_t és la temperatura en el interval de temps corresponent i \bar{T} és la temperatura mitjana diària. L'expressió $k_t \frac{(DO_{eq_t} - DO_t)}{Z_{mix}}$ correspon al gas intercanviat amb l'atmosfera, on k_t és la velocitat de transferència del gas, DO_{eq_t} és la concentració d'oxigen dissolt en l'equilibri a una salinitat, pressió i temperatura donades, i DO_t és la concentració mesurada d'oxigen dissolt. La k_t s'obté del coeficient de *Schmidt* per a l'oxigen en aigua salada considerant la temperatura de l'aigua (Wanninkhof, 1992), i basant-nos en les equacions de la velocitat del vent de Cole and Caraco (1998). El terme Z_{mix} fa referència a la fondària de la capa de barreja i Adv representa altres fluxos físics, com ara l'advecció o l'intercanvi en la vertical, que es consideren negligibles (Staehr et al., 2010).

El model amb aproximació bayesiana es basa en les oscil·lacions diàries d'oxigen dissolt, que deurà ser mesurat en alta freqüència. La freqüència recomanada i que es fa servir al PECT és de 10 minuts. Les mesures d'oxigen i d'altres variables necessàries, que seran comentades amb més detall posteriorment, es podran prendre en un únic punt, mitjançant un conjunt de sondes, si la llacuna es suficientment petita com per considerar que el punt escollit, representa força bé el que ocorre a la resta de la llacuna, és a dir, si no es tenen sospites d'una gran variabilitat horitzontal. De tenir sospites, es recomana la col·locació, encara que sigui per un període de

temps curt, d'un conjunt de sondes extra per comprovar si les dades s'assemblen al punt escollit com a representatiu i que sol ser un punt central, on la llacuna té major fondària. Un exemple d'un cas d'aquests podria ser si hi ha presència de macròfits, és possible que a zones més somes amb més abundància de macròfits els valors de metabolisme s'esbiaixen respecte al punt central, que pot ser més profund i amb poca o nul·la presència de macròfits. És necessari ressaltar, que encara que no es tinguin problemes o sospites significatives de variabilitat horitzontal, no es recomana la extrapolació de la producció a la superfície total de la llacuna, és a dir, el càlcul dels *budgets* totals, ja que el valor que obtindrem només es una aproximació (especialment si només es disposa d'un punt de *monitoring* per llacuna) i mai pot representar de manera absoluta la producció total del sistema.

De la mateixa manera que es poden tenir problemes amb la variabilitat en l'horitzontal, també podem tenir certa variabilitat en la vertical, especialment si la llacuna fa més d'un metre de fondària. Així, s'aconsella, al igual que el cas anterior, col·locar un conjunt de sondes a les profunditats pertinents per veure si les taxes metabòliques s'assemblen al valor mesurat en superfície. Es recomana fer-ho sobretot cada cop que canvien de forma considerable les condicions físiques, per exemple, en cada estació. Així es possible que una llacuna es trobi totalment barrejada durant la primavera i l'estiu però presenti certa estratificació durant la tardor i l'hivern.

Per poder fer córrer el script del model BASE haurem de disposar de l'*Rstudio* en l'ordinador corresponent. Aquest *software* o programa per anàlisis estadístics i gràfics és lliure i es troba disponible a l'enllaç <http://www.r-project.org/> on es podrà descarregar la versió més actual. També caldrà instal·lar el JAGS disponible a <http://mcmc-jags.sourceforge.net/>, i perquè funcionin correctament intentar mantenir actualitzats els dos entorns en la mesura del possible.

En primer lloc serà necessari fer una còpia de la carpeta BASE, disponible a la carpeta *arxius_manualPECT*, amb aquest mateix nom. Aquesta carpeta deu mantenir sempre la mateixa estructura i es recomana no crear més carpetes a dintre d'aquesta, i realitzar totes les diferents còpies o gestions a banda. S'ha de conèixer la ruta d'emmagatzematge que té la carpeta BASE a l'ordinador on s'enganxi (per exemple: C:/Users/maria/Desktop/BASE) per modificar la part del *script* corresponent, com veurem posteriorment. La carpeta conté diferents arxius i/o subcarpetes:

- carpeta *input*, allà es on abocarem la base de dades a analitzar en format .csv seguint el format que es menciona a l'apartat 5. En aquesta carpeta podrem incloure diferents arxius, encara que si posem varis, s'analitzaran tots de cop, generant un únic arxiu de resultats.

- carpeta *output*, aquesta carpeta és on aniran a parar els resultats de l'anàlisi, tant les dades diàries (*BASE_results.csv*) com les subdiàries (*instantaneous rates.csv*), així com les figures que ajudaran a la validació i selecció del model (*validation plots*), com es veurà més endavant a l'apartat 11.10 de l'annex. És molt important tenir en compte que els resultats generats deuran copiar-se a banda per fer córrer el model un segon cop ja que sinó es sobreescriran.

- arxiu *Call_BASE_v2.3.R* és un script d'*R*, al qual es referirem com a *script 1*, en el que es defineixen els vectors de les dades diàries i els paràmetres del model Bayesià dintre de l'entorn d'*R*. És en aquest *script* on l'*R* executa el model Bayesià amb el JAGS, però aquest procés ocorre en un segon pla i no el veiem, per tant, només s'executarà el codi des de l'*R*, i aquest serà

l'encarregat de fer funcionar el JAGS i el model Bayesià que analitzaran cada arxiu de dades inclòs a la carpeta *input* i abocaran els resultats a la carpeta *output*. Es recomana llegir i seguir les instruccions incloses en els apartats 5 i 6 per al bon funcionament del model.

- arxiu *BASE_metab_model_v2.3.txt* conté l'*script* del JAGS que conté el model Bayesià i al qual es referirem com a *script 2*. En el model original del BASE s'inclouïen correccions de temperatura i salinitat, però en la versió modificada per llacunes, aquestes correccions es realitzen a banda. En aquest manual es proporciona un *script* per tal de fer-ho (apartat 11.3 de l'annex). També es realitza el model de regressió diürn que ajusta les dades de l'oxigen mesurat. Es pot consultar Grace et al. (2015) per informació més detallada sobre el model de regressió.

Per poder estimar el metabolisme a partir de la modificació del model BASE es necessita obrir el *script Call_BASE_v2.3.R* i seguir els passos que s'especifiquen a continuació.

És necessari saber que no cal un domini exhaustiu de l'R però es recomana tenir certes nocions per facilitar la comprensió del model i la identificació de possibles problemes que puguin sortir.

La primera vegada que s'utilitzi el model serà necessària la instal·lació de diferents *packages*. A les línies 12-15 del *script* es troba el codi necessari per fer-ho:

```
12 install.packages("coda") ##run this line for installing the package (only the first
time using the model)
13 install.packages("R2jags") ##run this line for installing the package (only the first
time using the model)
14 install.packages("zoo") ##run this line for installing the package (only the first
time using the model)
15 install.packages("lattice") ##run this line for installing the package (only the first
time using the model)
```

Un cop realitzada la instal·lació no caldrà tornar a instal·lar i només caldrà executar els *packages* amb el codi disponible a les línies 17-20 cada vegada que vulguem fer córrer el model després d'haver tancat sessió a l'R.

```
17 library(coda)
18 library(R2jags)
19 library(zoo)
20 library(lattice)
```

Després de la instal·lació i execució dels *packages* necessaris trobem la part de l'*script* que es modificable per ajustar el model al tipus de sistema d'estudi i que es troba dividida en 4 parts (A, B, C i D).

Part A. En aquesta part de l'*script* (línia 27) s'ha d'especificar la ruta d'on es troba la carpeta BASE a l'ordinador. La carpeta que, com ja hem especificat abans en aquest mateix apartat, deu conservar sempre la mateixa estructura de carpetes i el nom.

A la línia 27 s'haurà de substituir la part en verd per la pròpia ruta d'emmagatzematge de la carpeta i es important conèixer que *Windows* sovint utilitza el signe "\" com separador dels nivells de carpeta però s'haurà de canviar per "/", tal i com es mostra a continuació, per tal de que ho reconega l'R i funcione correctament:

```
27 Directory <- "C:/Users/maria/Desktop"
```

Part B. En aquesta part de l'*script* (línia 32) es on es deu especificar el interval de mesura de l'oxigen dissolt en segons. Per exemple, en el cas del PECT s'especificaria 600s ja que l'interval de mesura és de 10 minuts.

```
32 interval <- 600
```

Part C. En aquesta part es defineixen el nombre d'iteracions del model bayesià i de *burn-in* o assentament. De forma predeterminada, amb els 3 paràmetres inicials de que partia el BASE, s'establien 20000 iteracions amb 10000 de *burn-in*, però per al PECT s'ha establert un total de 40000 amb 20000 de *burn-in*, per millorar la convergència. El nombre d'iteracions requerides es pot avaluar visualment i també fent una ullada a les estadístiques de convergència. Per tal d'uniformitzar els procediments al PECT, aconsellem no modificar aquests valors a no ser que es busqui molta més rapidesa a l'hora de l'anàlisi.

```
37 n.iter <- 40000
```

```
38 n.burnin <- n.iter*0.5
```

Part D. Aquesta part de l'*script* es pot modificar de manera opcional. En ella s'ofereix la possibilitat de transformar les dades que puguin tenir major soroll com ara l'oxigen dissolt i/o la irradiància/PAR per certs factors físics. En el cas de l'oxigen es pot fer servir la transformada ràpida de Fourier (Gallegos et al., 1977) que pot filtrar les fluctuacions de l'oxigen a alta freqüència per suavitzar la senyal diària d'interès. El valor de *hf.cutoff* a la línia 46 s'utilitza per establir la proporció de filtrat de pas baix (0-1), que és 0 de forma predeterminada (sense filtrat). Al treball d'Oliver and Merrick (2006), per exemple, es va utilitzar un valor de 0.88 (Figura 1).

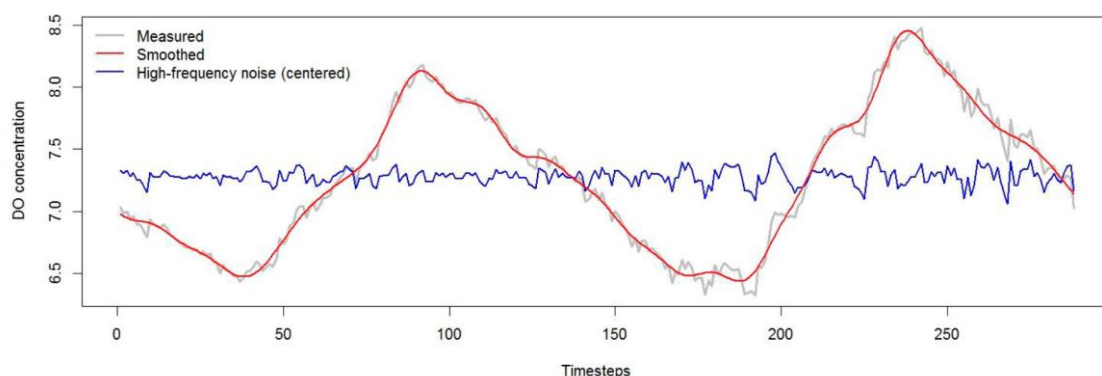


Figura 1. Exemple de filtrat o suavitzat de les dades d'oxigen de 48 hores amb una proporció de filtrat de pas baix del 88% (*hf.cutoff* <- 0.88) segons Oliver and Merrick (2006).

A més, també es pot filtrar o suavitzar els valors de PAR (l) canviant la part del *script* de la línia 49 a *smooth.PAR* <- TRUE per tal de realitzar una mitjana mòbil de 5 períodes de temps. No es recomana fer *smoothing* si les dades de la base de dades no son contigües ja que el filtrat serà aplicat a través de salts en el temps.

Al treball de la Pletera o PECT no s'estan fent aquest tipus de transformació de les dades i es treballa amb les dades pures, però de realitzar algun tipus de transformació, els gràfics es mostraran en els gràfics de validació (carpeta *validation plots* a *outputs*).

```
46 smooth.DO <- 0.0 #proportion
```

```
49 smooth.PAR <- FALSE #logical
```


Un cop modificades les parts A, B, C i D del *script* 1 també caldrà modificar en aquest *script* 1 la part corresponent al càlcul del paràmetre k_t . Així caldrà:

- indicar a la línia 140 l'altura de medició del vent, si aquesta és diferent a 10 metres.

```
140 windheight<- 10 ##10 by default if u10 has been calculated previously, in meters
```

- canviar el càlcul de la k_{600} a la línia 163 si es vol seguir una altra referencia distinta a Cole and Caraco (1998) o adaptar a una quantitat diferent de vent que afecta al sistema en qüestió.

```
162 #k600
```

```
163 k600<-(2.07+0.215*(wind10^1.7))/100
```

- canviar la part del *script* corresponent al càlcul del numero de *Schmidt* o Sc segons si es treballa en cossos d'aigua dolça o salada o si es vol seguir alguna referència distinta a Wanninkhof (1992). Comentar o descomentar les línies 166 o 167 segons correspongui. Per defecte es troba actiu o descomentat el càlcul per aigua salada:

```
165 #Sc
```

```
166 Sc<- 1953.4-(128*tempC)+(3.9918*tempC^2)-(0.050091*tempC^3) #for seawater, following wanninkhof, 1992
```

```
167 #Sc<- 1800.6-(120.1*tempC)+(3.7818*tempC^2)-(0.047608*tempC^3) # for freshwater, following wanninkhof, 1992
```

-també es pot canviar el valor de "n" corresponent a $2/3$ en la línia 170 per un valor de 0.5 que correspondria a una superfície de l'aigua més turbulenta degut a més vent en l'àrea d'estudi (vent $>3\text{m s}^{-1}$).

```
169 #k02
```

```
170 k02 <- k600*((Sc/600)^(-2/3))
```

La versió modificada del model BASE que s'utilitza, per defecte, estimarà quatre paràmetres: A , R , θ i p . No obstant, de forma opcional, també es podrà modificar una part del *script* 2, per poder fixar els valors de θ i p , a un valor fix, en cas de desitjar-ho. De no ser així aquests dos paràmetres de dependència de la temperatura i de saturació de la llum seran estimats a partir del model i les dades proporcionades dintre d'uns límits estrets i físicament realistes, la estimació dels quals podria millorar l'ajustament del model (mirar ajustament i validació del model en l'apartat 6 d'aquest informe).

Al *script* 2 (arxiu .txt, obrir-lo amb Bloc de Notes) es mantindran comentades (amb '#' inicial) les línies 14 i 15 i descomentades (sense '#' al davant) les línies 20 i 21 per estimar els valors de p i θ . Tal que així:

```
19 # (Z1) theta and p (effectively) fixed - xx just makes them stochastic
20 #p <- 1.0
21 #theta <- 1.07177
22
23 #(Z2) treat theta and p as estimable parameters
24 theta ~ dnorm(0.0,0.25)T(1.0,1.3)
25 p ~ dnorm(0.0,0.25)T(0.3,1.0)
```

Els valors necessaris per l'estimació dels paràmetres poden ser canviats a les línies 20 i 21.

Pel contrari, si es vol fixar els paràmetres p i θ es mantindrà el *script* tal que així:

```
19 # (Z1) theta and p (effectively) fixed - xx just makes them stochastic
20 p <- 1.0
21 theta <- 1.07177
```

```

22
23      #(z2) treat theta and p as estimable parameters
24      #theta ~ dnorm(0.0,0.25)T(1.0,1.3)
25      #p ~ dnorm(0.0,0.25)T(0.3,1.0)

```

Un cop realitzades les modificacions pertinents en les diferents parts del *script* 1 i 2 mencionades anteriorment, d'acord amb el sistema d'estudi o les condicions d'aquest, ja es pot fer córrer el model. Recordar que només caldrà executar el *script* 1, i que és aquest el que executa el *script* 2 en el programa *JAGS*. A l'hora d'analitzar cal tenir en compte que el model pot trigar uns quants minuts per dia, així que dependrà dels dies inclosos a la base de dades per calcular més o menys el temps total d'anàlisi, i en els que l'ordinador cal que estigui encès i a ser possible connectat a la corrent. En cas necessari es pot pressionar la tecla ESC per aturar l'anàlisi. Els resultats van guardant-se de forma automàtica després de cada dia i s'aturaran un cop s'hagin analitzat tots els dies inclosos en la base de dades o en l'últim dia en ser analitzat quan es va pressionar la tecla ESC.

L'avanç en l'anàlisi es pot comprovar amb les figures generades a la carpeta *outputs>validation plots*. No es possible consultar-ho a la base de dades (.csv) generada en *outputs* ja que provocarà problemes en el registre dels futurs resultats. Tots els detalls sobre els resultats del model es mostren a l'apartat 6 d'aquest informe.

3. Variables fisicoquímiques implicades, dades necessàries i sondes de mesura

Per a la estima del metabolisme ecosistèmic serà necessària la mesura de tota una sèrie de variables que s'enumeren a continuació. Per cadascuna d'aquestes variables s'ofereix una proposta de sonda per la seua mesura, que són les que s'utilitzen en el marc del PECT. No obstant, l'oferta al mercat és variada i es podria escollir un altre model en funció de les necessitats sempre i quan les següents variables puguin estimar-se en les unitats pertinents o transformar-se *a posteriori*.

- Radiació fotosintèticament activa o PAR (abreujada al model com a *I*; en $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$).

La sonda que s'utilitza és el *HOBO Pendant data logger MX2202* de *Onset* (Figura A6) que recull tant dades de temperatura com de llum. La instal·lació d'aquesta sonda pot ser tant a l'exterior (registrant dades de radiació i temperatura ambient) com a l'interior del sistema. No obstant, d'instal·lar-se dins l'aigua s'hauria de tenir en compte la neteja periòdica (inferior al mes) per possibles problemes amb el *fouling* (aspecte molt dependent del tipus de sistema).

Al projecte PECT la sonda es troba instal·lada a l'exterior mesurant tot l'espectre de radiació en *lux*. La utilització d'aquestes dades per al metabolisme requereix de transformació, de manera que els valors obtinguts en *lux* (I_{global}) es transformen a flux de fotons ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) en el rang de l'espectre 400-700 nm, el corresponent a la radiació fotosintèticament activa (*I*), de la manera següent segons Sager and McFarlane (1997):

$$I (\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}) = I_{\text{global}} (\text{lux}) \times 0.019$$

De no disposar d'una sonda específica, es pot fer ús de les dades meteorològiques proporcionades per alguna estació meteorològica propera. A l'apartat 11.7 de l'annex es proporciona un treball on es compara la diferència en les mesures de les sondes col·locades en

diferents llocs. Si les dades d'aquesta es recullen en valors d'irradiància en $W m^{-2}$, es pot fer servir la transformació de Giling et al. (2017) i referències incloses:

$$I (\mu mol m^{-2} s^{-1}) = I_{global} (W m^{-2}) \times 4.6 \times 0.45$$

No obstant, quan la sonda s'instal·la a l'exterior no podem obviar certs problemes que, segons el lloc, podrien donar-se, com la posada d'aus a l'estructura on s'ha col·locat la sonda. Això podria tractar d'evitar-se col·locant algun element punxant, com ara un clau o cargol. També podem trobar interferències en la mesura per la proximitat d'enllumenat públic o privat, com ara una farola. Col·locar la sonda a l'exterior potser no requereix d'una neteja tant sovint com si estigués a l'aigua però serà necessària la seua neteja mensual per garantir que no hi han errades o desviacions significatives al recollir les dades.

- Concentració d'oxigen dissolt (abreujada al model com a *DO.meas*; en $mg L^{-1}$).

La sonda que s'utilitza al projecte PECT per a les mesures d'oxigen és la *miniDOT* de PME (*Precision Measurement Engineering*) (Figura A1). Segons la informació del fabricant, la sonda *miniDOT* realitza la lectura d'oxigen en % de saturació i, posteriorment, el mateix equip calcula la concentració d'oxigen a partir de la temperatura (que llegeix simultàniament la mateixa sonda) i de la pressió atmosfèrica i la salinitat (paràmetres que no mesura la sonda, sinó que s'han d'afegir manualment al *software* de l'equip abans de començar les lectures). Si la salinitat no és constant aquesta correcció no es pot fer i, com a conseqüència, les dades d'oxigen aportades per la sonda en $mg L^{-1}$ s'han de corregir *a posteriori*.

A l'apartat 11.3 de l'annex es troba un *script* per realitzar la correcció de l'oxigen dissolt en funció de la salinitat i la temperatura segons Benson and Krause (1984).

- Percentatge de saturació d'oxigen dissolt (abreujada al model com a *DOsat*; en %).

Aquesta variable es va haver d'afegir al model original del BASE, dissenyat pel càlcul de metabolisme en rius, per al càlcul de l'intercanvi de gasos amb l'atmosfera. Però també resulta necessària, com ja s'ha comentat, per calcular el valor de la concentració d'oxigen dissolt a partir de la temperatura i la salinitat/conductivitat.

Aquesta variable no pateix cap modificació i s'utilitza de manera idèntica (en %) conforme l'ofereix la sonda *miniDOT* (Figura A1).

- Temperatura de l'aigua (abreujada al model com a *tempC*; en °C).

Totes les sondes solen incorporar lectures de temperatura. En cas que hi hagi diferències en la mesura de temperatura entre sondes recomanem la mesura de la temperatura de l'aigua amb la mateixa sonda que es mesura l'oxigen, en aquest cas, com ja s'ha comentat la sonda *miniDOT* de PME (*Precision Measurement Engineering*) (Figura A1).

- Pressió atmosfèrica (abreujada al model com a *Atmo.pressure*; en atm). Pot indicar-se un valor de 1 al llarg de la sèrie temporal si no es coneix el valor de pressió i l'altitud és propera al nivell del mar. En el cas de que l'altitud sigui alta, els valors d'oxigen també hauran de ser corregits per la pressió.

En el cas del projecte PECT indiquem un valor constant de 1 atm en aquesta variable.

- Salinitat de l'aigua (abreujada al model com a *salinity*; en ppt) . Al igual que la pressió es pot mantenir un valor constant i indicar un valor de 0 si la salinitat es baixa al sistema o no es coneix. En el cas del projecte PECT indiquem un valor constant de 0 en aquesta variable ja que les correccions de l'oxigen per salinitat es calculen en un *script* a banda del model i que es pot trobar a l'apartat 11.3 de l'annex.

En el cas del projecte PECT s'utilitza la sonda CTD *diver* de *vanEssen Instruments* (Figura A2) mitjançant la qual s'obtenen valors de conductivitat específica en mS cm^{-1} que són transformats a valors de salinitat segons APHA (2005) tal i com es mostra al *script* a l'apartat 11.3 de l'annex.

- Vent (abreujada al model com a *wind*; en m s^{-1})

La sonda que s'utilitza en el PECT per a la mesura del vent és la *Kestrel 5000* de *KestrelMeters* (Figura A5), encara que es tracta d'una sonda de bona qualitat, té desavantatges com ara la poca memòria que té i el temps de descarrega de les dades ja que el procés sol ser una mica lent. Per la resta, és una sonda eficient que proporciona dades de vent en m s^{-1} .

- Fondària de la capa de barreja (abreujada al model com a *Zmix*; en m). Es refereix al gruix de la capa d'aigua superficial on es trobarien els productors primaris. Quan es tracta d'un sistema som i sense estratificació, aquesta variables correspon al nivell d'aigua de la llacuna. Si es tracta d'un sistema estratificat aquest valor pot ser estimat de diferents maneres. Una d'elles podria ser, utilitzant mesures de temperatura o densitat en fondària tal i com s'explica a Wilson et al. (2020).

La sonda utilitzada al PECT i recomanada per a la estimació dels nivells d'aigua és la CERA-DIVER de *vanEssen Instruments* (Figura A3). Aquesta sonda, situada a una fondària fixa i coneguda de la llacuna, proporciona valors de pressió (en atm) que són compensats amb valors de pressió a la superfície i que són recollits per altra sonda anomenada BARO-DIVER de *vanEssen Instruments* també (Figura A4). El *software* que inclouen aquestes sondes per descarregar les dades, permet compensar les dues bases de dades obtingudes (provinents de les dues sondes) d'una manera bastant senzilla i ràpida.

4. Procediment al camp

4.1. Instal·lació i mesures

4.1.2. Sondes exteriors

En quant a la instal·lació de les sondes un cop adquirides és relativament senzilla. Com es comentava, la sonda de vent hauria de instal·lar-se a l'exterior, a una alçada coneguda, i en una localització que podria ser extrapolable a diferents sistemes aquàtics propers, per tal d'aprofitar les mateixes dades, però deu ubicar-se en una àrea representativa del vent de la zona a estudiar. Aquesta sonda posseeix una base fixa (que es cargola a l'element que es consideri de fixació i d'altra rotatòria que deu respectar-se per tal de que la vela de la sonda giri en direcció al vent i pugui prendre les mesures.

La sonda de llum o radiació, com comentàvem, és molt versàtil i podria col·locar-se tant a l'interior de l'aigua com a l'exterior. La seua instal·lació a l'interior proporcionaria dades més acurades de la llum de la llacuna però requeriria d'un major manteniment per tal d'evitar errades per acumulació de *fouling*. A l'exterior la neteja també seria necessària però menys freqüent. En

ambdós casos la sonda deuria col·locar-se en algun element fixe al qual la podem cargolar ajudant-nos de les estructures amb forat que té als laterals, com es pot veure a la imatge (Figura A6).

Per últim, en un lloc proper a l'àrea d'estudi i fora de l'aigua s'ha de situar la sonda que mesura la pressió atmosfèrica (*BARO-diver*) i que ens servirà de referència i per compensar les dades recollides per la/es sonda/es que mesura/en la pressió, i per tant, el nivell de l'aigua (*CERA-diver*). Aquesta sonda no té requeriments d'instal·lació, l'únic que es recomana es situar-la en un lloc protegit del sol. A més, cal mencionar que la pròpia marca de la sonda assegura que es pot fer servir un mateix *BARO-diver* per compensar la pressió de varis *CERA-diver*, sempre i quan es troben en una àrea de la mateixa elevació i a una distància de 15 km màxim.

4.1.3. Sondes submergides

La sondes per mesurar l'oxigen, temperatura i salinitat poden i deurien ser instal·lades a prop una de l'altra, a la superfície, penjades d'una estructura com ara una boia però assegurant-nos que si al sistema hi ha variacions considerables de nivell no queden a l'aire ni submergides a molta fondària. També amb una estructura que eviti que es moguin excessivament en l'horitzontal i en un lloc representatiu de la llacuna, especialment, si només es compta amb una sonda per cadascuna de les variables necessàries.

I, per últim, la sonda que mesura el nivell de l'aigua, deu estar sempre sota l'aigua i a una fondària coneguda, ja que mesurarà els valors de pressió en eixe punt, que necessita ser introduït de manera exacta al *software* de la sonda pels càlculs pertinents. Per la seua instal·lació s'aconsella un fil d'acer inoxidable d'una longitud coneguda o la fixació de la sonda a un estructura tubular que pugi fixar-se i permeti tenir la sonda a una fondària constant.

4.2. Neteja i calibratge

Les sondes de llum, vent, nivell d'aigua i pressió atmosfèrica requereixen d'un manteniment menor. Es recomana netejar-les un cop o dos al mes, depenent del sistema i època de l'any, per evitar l'acumulació de brutícia i/o *fouling*. En aquest cas, més que un calibratge, es recomana comparar les dades amb alguna estació meteorològica propera, especialment si hi ha períodes on les dades pateixen variacions que poden ser degudes a mal funcionament de les sondes i no a fenòmens naturals.

Les sondes que van a requerir d'un manteniment més exhaustiu són les sondes d'oxigen i temperatura i de salinitat. Aquestes sondes, requereixen mínim d'una neteja mensual, no obstant, aquest període dependrà molt del sistema d'estudi i la temporada de l'any. És important realitzar anotacions al camp per veure durant quins períodes les sondes tenen més o menys *fouling* per adaptar-nos a aquest esdeveniments i tractar de mantenir les sondes en bon estat i mesurant correctament. A més, necessitarem quantificar en quina mesura el *fouling* generat en eixe període altera les dades de manera significativa, per la qual cosa, es realitzaran el que anomenem calibratges en determinats períodes per veure si l'acumulació del *fouling* amb el temps ha ocasionat *drifts* o desviacions en les mesures. Perquè aquesta qüestió quedi més clara, es proporciona un exemple. Si durant l'hivern detectem poca acumulació de *fouling*, de manera que durant els mostresos aconseguim treure amb un drap o paper de forma suau per tractar-se d'un *fouling* no calcari, i amb un dels calibratges veiem que l'afectació es menyspreable, podrem

prolongar el temps entre calibratges ja que el *fouling* acumulat és similar i podem assumir que actuarà de manera semblant a l'anterior, que ja hem testat amb un calibratge. Per contra, si detectem un *fouling* més agressiu a la sonda, no només es requerirà d'acurtar el temps entre neteges sinó que caldrà valorar la realització de calibratges menys espaiats en el temps per veure l'afectació d'aquest *fouling* a les dades.

Pel que fa als calibratges, no es tracta de calibratges a nivell intern de les sondes, almenys amb les sondes recomanades anteriorment, sinó que es tracta d'una sèrie de comprovacions amb solucions conegudes, per veure el *drift* del valor mesurat i el valor real de la sonda donat el *fouling* acumulat durant el temps que la sonda ha estat instal·lada. Durant aquest procés es recomana treure la sonda de l'aigua i sense alterar l'àrea on la sonda té el sensor, canviar la freqüència amb la que es prenen les dades i augmentar-la per tal de tenir més mesures en poc temps. A continuació la sonda es col·locarà en solucions conegudes. En el cas de la sonda d'oxigen i temperatura, es pot introduir en un recipient amb aigua airejada, de temperatura i concentració d'oxigen coneguda (al voltant de 100% de saturació) encara que podem tenir alguna sonda multiparamètrica portàtil per comparar dades. En el cas de la sonda de conductivitat o salinitat, pot ser introduïda en una solució comercial de salinitat coneguda. El temps per submergir les sondes en aquestes solucions pot ser variable però aconsellem tenir varies mesures per estar-ne segurs del que està mesurant la sonda. Posteriorment es netejaran les sondes amb l'ajuda de paper, drap o raspall poc agressius, etc., o segons indiqui la marca comercial corresponent. Per exemple, en el cas de la *miniDOT* amb *fouling* de tipus calcari es fa servir vinagre i un raspall suau. Un cop netejada la sonda, s'introdueix de nou la sonda en les solucions preparades i es prenen mesures per veure si hi ha variació amb les mesures preses abans. Per últim i un poc registrats els possibles *drifts*, s'ajusta de nou a freqüència de mesura desitjada (en aquest cas, 10 minuts) i es deposita en el lloc de mostreig de l'estudi. Si es detecta algun *drift* a les dades, aquestes deuran ser corregides d'acord amb el *drift* assumint, per exemple, una desviació lineal en el temps. Un exemple de procediment de correcció es pot trobar al treball de Grace and Imberguer (2006) (apartat 3.6.1).

4.3. Comprovació funcionament correcte i bateries

En els dies en que es netegen les sondes i s'aprofita per descarregar les dades, per seguretat, com es comentarà a l'apartat següent, es pot aprofitar i comprovar que els últims valors de la sonda són coherents i que l'estat de la bateria es l'idoni i serà suficient fins el pròxim mostreig.

Algunes sondes, com la que es recomana per a la mesura de l'oxigen, proporcionen un valor que serveix de referència per conèixer el bon estat de la sonda i de les seues mesures, en el cas de la *miniDOT* en el valor de Q. A grans trets, aquest valor s'obté de la mesura de l'oxigen per dues vies diferents, però deu estar pròxim a 1, si mitjançant els dos mètodes la mesura d'oxigen és molt similar, el que indicaria que la sonda funciona en condicions òptimes. Si el valor de Q, ràtio entre les dues mesures d'oxigen per cada interval de temps es menor a 0.7 indica que la sonda requereix ser retirada i revisada ja que no mesura correctament.

4.4. Obtenció de les dades

Encara que aquest procés va a dependre del tipus de sonda utilitzada, l'obtenció o descarrega de les dades tindrà lloc mitjançant la connexió d'un ordinador portàtil i/o telèfon mòbil. Es recomana

descarregar de manera periòdica, si es possible un cop al mes i sinó cada dos mesos per assegurar-nos no perdre les dades i garantir que la sonda funciona i llegeix correctament.

En el dia de descarrega que sol coincidir amb el dia de mostreig es generen buits a la base de dades, es recomana eliminar aquest dia de la base de dades, ja que, entre altres coses hem causat alteració al sistema i, per tant, a les mesures.

5. Format de la base de dades per al model

Com ja s'ha comentat, la carpeta anomenada *BASE*, que deurà estar a l'ordinador de treball, i que conté l'arxiu d'*R* per fer córrer el model també conté una carpeta anomenada *input*. És en aquesta carpeta on devem enganxar l'arxiu/s de les dades necessàries per al càlcul del metabolisme. Aquest arxiu deurà comptar amb un format molt específic per a que l'*R* el reconegui i sigui capaç de treballar de forma correcta, així, a l'apartat 11.11 de l'annex i a la carpeta *BASE_amb_exemple* (a la carpeta *arxius_manualPECT*) es proporcionen exemples.

- Deurà ser un arxiu en format .csv, arxiu amb les dades separades per “,”. A la carpeta *input* es podran posar diferents arxius a analitzar però l'*R*, aleshores, analitzarà cada un d'ells com si es tractés d'un únic arxiu, proporcionant només un arxiu de resultats. Es recomana, revisar l'arxiu csv (obrint-lo amb bloc de notes), per comprovar que efectivament els elements es troben separats per comes, ja que un error molt comú és no realitzar aquesta comprovació, especialment quan passem d'un arxiu xls o xlsx a csv i l'element separador per defecte són punt i comes en lloc de comes, el que provoca error al fer córrer el model.
- Com ja s'ha vist en l'apartat deurà contenir les variables: *Date*, *Time*, *Dosat*, *tempC*, *DO.meas*, *atmo.pressure*, *salinity*, *wind*, *Zmix* en les unitats pertinents. Les variables deuran anomenar-se com s'indica i respectar les majúscules i minúscules.
- La variable *Date*, amb la data, deurà tenir format aaa-mm-dd.
- La variable *Time*, amb les hores, deurà tenir format hh:mm:ss.

Hi ha tota una sèrie d'aspectes que són de vital importància per al funcionament correcte del model i de la correcta estimació del metabolisme, per tant, els haurem de tenir molt present per evitar errades:

- A les bases de dades es treballa amb l'hora en UTC (temps universal coordinat) o hora solar. Per tant, totes les variables, provinents de les diferents sondes, deuran estar en aquest format. La majoria de les sondes, com la *miniDOT* (mesures d'oxigen i temperatura), ja ofereixen a les bases de dades aquest format, no obstant, d'altres, com la *HOBO Pendant* (dades de radiació i temperatura ambient) no.
- Es recomana depurar les dades una mica abans de fer-les accessibles per fer córrer el model. Com es comenta anteriorment, treballant a la natura es poden donar diferents situacions que poden alterar les dades i que provoquen variacions que no són degudes a les fluctuacions naturals de la variable en qüestió. Per dita tasca, ens podem ajudar de gràfiques en les que ràpidament podem identificar períodes o moments on la sonda pot estar funcionant malament o tenir una pertorbació no deguda a un fenomen natural. En aquest informe es presenta un *script* (*grafiques_dinamiques*, apartat 11.5 de l'annex) que permet fer gràfiques dinàmiques amb *R*, és a dir, gràfiques que permeten navegar a

l'usuari a través d'aquestes podent fer zoom en moments puntuals o focalitzar-se en mesures puntuals, en cas necessari.

- Actualment el model assumeix que les dades s'ofereixen en alta freqüència, mesurades cada 10 minuts, per tant, al dia cada variable deu incloure 144 registres. Si en algun cas, no es disposa de les 144 dades, és a dir, hi ha buits, es deuria descartar el dia complet per a que el model funcioni o, si ho creiem convenient, realitzar una interpolació simple de la variable en qüestió, tal i com es proposa al apartat 11.6 de l'annex. Aquesta última opció només s'aconsella si es tracta de poques dades i confiem en que la interpolació, donat el moment, podria acostar-se a la dada real.
- Si es desitja canviar el interval de temps de mesura (diferent al de 600 s/ 10 min) a l'hora de l'anàlisi dels resultats hauríem de canviar la part del *script* corresponent (línia 32, *script* 1) tenint en compte les unitats en que s'ha d'especificar (segons) i que a l'hora d'executar el model o *script* l'arxiu o arxius inclosos han d'incloure el mateix interval de mesura.

6. Anàlisi dels resultats

A la mateixa carpeta *BASE* on trobem la carpeta *input* també trobarem una anomenada *output*, en ella aniran a parar tots els resultats un cop comencem a córrer el model. Es convenient no obrir un dels arxius que es genera, el *BASE_results.csv* mentre s'executa el *script* per evitar errades en el registre de les dades.

A la carpeta, per tant, hi constarà un arxiu *BASE_results.csv* on trobarem les mitjanes, medianes i desviacions estàndard de les taxes metabòliques, així com altres paràmetres que estima el model i que es veuran en detall posteriorment. Cada fila dintre d'aquest fitxer correspon a la dada diària dels 144 registres proporcionats per eixe dia. Les taxes metabòliques GPP (producció primària bruta) i ER (respiració ecosistèmica) es proporcionen en $\text{mg O}_2 \text{ L}^{-1} \text{ d}^{-1}$. També podem trobar la estima de la NEP (producció ecosistèmica neta) i PR (ràtio entre la producció i la respiració).

Es recomana fer una còpia de la carpeta *output* en altre lloc de l'ordinador, per conservar els resultats, ja que si es torna a posar en funcionament el model, els resultats es sobreescrurien.

A la mateixa carpeta també podem trobar altres tipus de resultats, entre ells, una carpeta anomenada *instantaneous rates* amb l'arxiu *instantaneous_rates.csv* en el que hi consten les taxes metabòliques GPP i ER corresponent a 10 minuts (interval de temps fixat o proporcionat en aquest cas) i per tant es troben en les unitats $\text{mg O}_2 \text{ L}^{-1} 600 \text{ s}$. Aquest arxiu pot resultar interessant si es vol conèixer la variació del metabolisme a una escala de temps subdiària.

La selecció i validació del model es pot realitzar de diferents maneres, totes elles necessàries i complementàries i que es poden trobar a la *Supporting Information* de Grace et al. (2015). Encara que a continuació es proporciona informació detallada de cadascun dels paràmetres que poden utilitzar-se per avaluar el bon ajustament del model, per major brevetat i especificitat, s'aconsella mirar el resum dels paràmetres necessaris i els valors que aquests deuen prendre a l'apartat 11.9 de l'annex.

D'una banda, és vital assegurar-se que les cadenes de Markov (mètodes de Montecarlo, MCMC) hagin convergint adequadament cap a una distribució estacionària, cosa que garantirà una bona estima dels paràmetres del model (A , θ , p , R i GPP). Per a això utilitzarem dues validacions, una de quantitativa i d'altra qualitativa. La quantitativa utilitza els valors del estadístic Gelman-Rubin per als paràmetres A , θ , p , R i GPP i que es mostren a l'arxiu de resultats com a $A.Rhat$, $p.Rhat$, $\theta.Rhat$, $R.Rhat$ i $GPP.Rhat$. Aquest paràmetre estadístic deu estar pròxim a 1, el que indica bona convergència. Si els valors són >1.1 indiquen baixa convergència de les cadenes. Per facilitar la validació de la convergència dels diferents paràmetres a l'arxiu de resultats també es mostra una variable anomenada "*convergence.check*" que indicarà "*Fine*" si tots els valors del Gelman-Rubin són menors que 1.1 e indiquen bona convergència o "*Check convergence*" quan almenys un dels paràmetres ha mostrat una mala barreja de les cadenes. Si la convergència per algun dels paràmetres d'un dia determinat no és adequada, el programa, de forma addicional i paral·lela, farà córrer de nou el model amb les iteracions pertinents, cosa que incrementarà el temps d'anàlisi de les dades i especialment si això ocorre en varis dels dies a analitzar. El progrés de les mostres a analitzar de forma addicional es podrà observar amb unes línies de progrés a la consola de *Rstudio*. Per tant, la convergència es pot arribar a millorar (encara que no sempre) modificant el número d'iteracions o, amb un bon domini de *JAGS* i *R2JAGS*, es poden canviar les distribucions anteriors i els valors inicials dels paràmetres per adaptar-los al sistema i millorar així la convergència. També podem validar la convergència d'una manera qualitativa amb l'ajuda dels gràfics que apareixen a la subcarpeta anomenada *validation plots* (a la carpeta *output*) que conté gràfics en format imatge (.jpg) per avaluar la convergència i l'ajustament del model. En concret, el model genera una gràfica múltiple per cada dia inclòs a l'anàlisi entre els quals es mostren els gràfics traça de les cadenes de Markov per als paràmetres del model A , θ , p i R . Les tres cadenes que apareixen en la gràfica del paràmetre corresponent deuen haver convergint, és a dir, estar superposades o coincidents, i a més, ser estacionàries, és a dir, centrades. Per veure-ho d'una forma més clara, consultar l'apartat 11.10 de l'annex, on es mostren diferents situacions que ajudaran per tal de saber analitzar millor aquest tipus de gràfiques. Si al model escollim fixar els paràmetres p i θ , com s'explica a l'apartat 2, les gràfiques mostraran una línia horitzontal sense variació.

De forma similar a la convergència dels paràmetres, l'ajust del model també es pot avaluar de manera qualitativa o quantitativa (Grace et al., 2015). Per a la qualitativa es faran servir també els gràfics de validació, comentats anteriorment, en aquest cas la gràfica que representa l'oxigen mesurat (cerques buits) i l'oxigen predit (línia negra) juntament amb les gràfiques de temperatura i radiació mesurades per cada dia inclòs a l'estudi (apartat 11.10). Aquestes gràfiques ajudaran a que, de forma visual, es pugui confirmar l'ajustament de la corba e identificar ràpidament qualsevol discrepància en el model o les dades. Les inconsistències amb les dades poden indicar-nos una violació de la suposició en el model de l'oxigen (*free-water*) en el que la GPP i la ER són els únics processos que contribueixen a les variacions d'oxigen dissolt a les llacunes. Per exemple, un fort augment o disminució de la temperatura o d'oxigen podria indicar-nos que hi ha hagut alguna entrada externa d'aigua al sistema. S'ha de tenir en compte que, inclús si l'ajustament del model és visualment adequat, les estimacions dels paràmetres no seran fiables si les cadenes no han convergint. Per altra banda, es tenen diferents formes quantitatives d'avaluar l'ajustament del model, que podem trobar a la base de dades de resultats *BASE_results.csv* i que s'enumeren a continuació:

- pD és el nombre efectiu de paràmetres i deu ser un número positiu. Un pD negatiu podria indicar que la mitjana posterior no és una bona mesura de la distribució posterior, i que és probable que hi haja algun problema amb el model.
- PPP o columna $PPfit.mean$ a la taula de resultats és el valor predictiu posterior de p i compara la falta d'ajustament del model a les dades reals davant la falta d'ajustament a una distribució de possibles discrepàncies del model utilitzant dades simulades del model parametrizat. Un valor de PPP de 0.5 indicaria un model plausible, mentre que valors <0.1 o >0.9 indicarien que el model parametrizat no constitueix una bona explicació per a les dades reals observades.
- R^2 o valor de correlació entre l'oxigen dissolt observat i modelat. Pot oscil·lar entre 0 i 1, en el cas del projecte PECT, i seguint estudis similars (Giling et al., 2017; Bas-Silvestre et al., 2020), es considera un bon ajustament quan el valor d' R^2 es igual o superior a 0.4. No obstant, poden donar-se valors alts d' R^2 degut a la autocorrelació temporal de la sèrie temporal de l'oxigen, encara que hi hagin valors estimats pel model per dalt o per baix dels valors mitjans. En aquests casos, l'ajustament deficient podria indicar-se mitjançant els paràmetres que s'especifiquen a continuació.
- $rmse$ és l'error quadrat residual. És específic de la magnitud del conjunt de dades i s'ha d'avaluar amb models de diferents dies al mateix lloc. S'expressa en relació a la variació punt a punt del conjunt de dades mitjançant els valors de la columna $rmse.relative$.
- $mrl.fraction$ es la proporció de temps ocupada per la tirada de valors més llarga per a la qual l'oxigen estimat està per sota o per sobre de l'oxigen mesurat. Valors alts d'aquesta proporció poden indicar una sobreestimació o subestimació consistent de l'oxigen i les gràfiques s'haurien de repassar, encara que els valors d' R^2 fossin alts, d'acord al que s'ha comentat anteriorment.

Més enllà de la validació del model, a la taula de resultats s'ofereixen els valors del paràmetre DIC (*Deviance Information Criterion*), el que té en compte la complexitat del model i pot ser utilitzat per seleccionar el millor model (per exemple, un model de 2, 3 o 4 paràmetres). El valor de DIC deu ser negatiu i a valors més baixos, millor és el model, és a dir aquells amb major DIC si considerem DIC en valor absolut. Encara que no hi ha una regla estricta al respecte es parla de que una diferència de 5 o superior a 5 en la puntuació de DIC en diferents models, seria suficient per afirmar que el model amb menor DIC seria millor que l'altre o altres amb el que es compara.

7. Càlculs complementaris: taxes metabòliques estandarditzades.

Pot ser que, de forma complementaria als càlculs del metabolisme, sigui interessant calcular les taxes metabòliques estandarditzades per evitar els efectes de llum i/o temperatura de les taxes obtingudes amb el BASE (vegeu més detalls a continuació, a l'apartat 8). Per a tal fi es proporciona un *script* a l'apartat 11.4 de l'annex en el que es poden realitzar amb facilitat aquests càlculs.

De forma similar al BASE, per tal de que el *script* funcioni de manera adequada s'hauran de tenir en compte diferents aspectes de format de la base de dades que també s'especifiquen al *script* (l'apartat 11.4 de l'annex):

-la base dades rebrà el nom de 'data' i tindrà un format csv.

-la base de dades haurà de contenir, com a mínim, el següent conjunt de variables: *Date* (com a identificador), *A.median*, *I.max*, *p.median*, *GPP.mean*, *theta.median*, *tempC.mean*, *ER.mean*.

Cal recordar que la majoria d'aquestes variables, a excepció de la *I.max*, que s'explicarà a continuació, provenen dels resultats a escala diària del BASE (arxiu *BASE_results.csv*). Cal fixar-se que, en el cas de les taxes metabòliques es selecciona i treballa amb la mitjana (*GPP.mean* i *ER.mean*), mentre que en el cas dels paràmetres, es seleccionaran les medianes (*A.median*, *p.median*, *theta.median*) ja que aquests paràmetres no sempre tenen una distribució normal i resulta més correcte treballar amb la mediana. La variable *I.max* correspon al valor màxim de radiació fotosintèticament activa o PAR (en $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) a que es vulgui fixar per a la estandardització de producció màxima. Al PECT, per conveni, es fa servir un valor de 2165, segons Bas-Silvestre et al. (2020), amb estudis realitzats a la Pletera.

8. Paràmetres útils per la mesura de l'estat ecològic: avantatges e inconvenients del seu ús.

Amb l'estimació del metabolisme ecosistèmic s'obtiniran les taxes metabòliques, tant les mesurades o modelades com les estandarditzades, a l'hora que tota una sèrie de paràmetres relacionats amb el metabolisme que podran resultar-nos interessants des d'un punt de vista ecològic i d'ecosistema.

D'una banda, com ja s'ha mencionat, s'obtenen les taxes metabòliques tant diàries com subdiàries a nivell d'ecosistema (GPP, ER, NEP). Amb aquestes, podrem obtenir les variacions diàries del metabolisme en el ecosistema permetent-nos entendre millor el funcionament de l'hàbitat des d'un punt de vista metabòlic però també correlacionar aquestes dades amb altres factors de tipus físic, químic i/o biològic per entendre determinades situacions. D'entre molts aspectes interessants, aquestes dades ens permetran saber si el sistema actua d'embornal o emissor de carboni. No obstant, treballar amb aquestes dades pot plantejar diversos problemes. D'entre ells, trobaríem l'efecte que la temperatura i la estacionalitat tenen en aquestes dades, així, una possible solució, com veurem, seria l'opció de treballar amb les dades estandarditzades on podríem reduir l'efecte de la temperatura i la llum. Però, d'altra banda, també trobarem que, degut al funcionament del model, haurem de prescindir de tota una sèrie de dades o dies estimats que han sigut descartats pel model per mala convergència en l'estimació dels paràmetres o poc ajustament de les dades de l'oxigen en el model. Aleshores, perdem informació i dades amb les quals podria resultar interessant treballar. Com ja sabem, seria incorrecte considerar aquestes dades per anàlisis posteriors, però podria ser que els dies descartats ho siguin precisament per l'alteració del sistema per algun fenomen de tipus pulsàtil, com un temporal, una entrada d'aigua subterrània, etc. i amb els que es descarta la possibilitat de treballar i anar més enllà.

Com ja s'ha mencionat, per tractar de reduir l'efecte de la llum i la temperatura, es té l'oportunitat de treballar amb les dades estandarditzades per llum i temperatura, un dels factors de que depenen més la producció i la respiració. Encara que resulta molt interessant treballar amb elles per reduir l'efecte estacional que pot donar-se en alguns sistemes, no podem obviar que l'estandardització es pot realitzar de diferents maneres i totes i cadascuna tindran algun error d'estimació que haurem d'assumir. En el cas de la respiració cal mencionar que al PECT es realitza l'estandardització considerant la termodependència d'Arrhenius, considerant treballs anteriors (Giling et al., 2017; Bas-Silvestre et al., 2020). Aquesta es pot realitzar amb un valor fixat del paràmetre *theta*, com amb un valor estimat de *theta* obtingut al propi model BASE. Al PECT i treballs anteriors realitzat a zones properes (Bas-Silvestre et al., 2020) s'ha considerat més acurat treballar amb el valor estimat de *theta*. Encara que la termodependència en el cas de la producció diferiria de la de la respiració, s'aplica a la producció la termodependència d'Arrhenius de forma

idèntica a la respiració, assumint cert error degut a la manca d'estudis i informació al respecte. A més, per l'estandardització de la producció, també es treballa amb els paràmetres A (contant diària que representa la producció primària per quàntum de llum, és a dir, l'eficiència fotosintètica) i p (coeficient que reflecteix l'habilitat dels productors primaris per utilitzar la energia lumínica incident) amb el valor estimat pel model BASE i no amb un valor fixat, assumint que aquesta és la manera més acurada i de menor error.

Per finalitzar, cal mencionar, que a banda de les taxes metabòliques estimades i estandarditzades els paràmetres obtinguts amb el model (A , p , $theta$) i les seues oscil·lacions/variacions també podrien resultar interessants per treballar-hi, al igual que alguns dels paràmetres que s'utilitzen per l'ajustament i selecció del model, com l' R^2 . Aquests últims paràmetres, a diferència de les taxes i paràmetres de dies descartats, no patiran de la selecció de dades, podent treballar amb la base de dades completa. Encara considerant aquests avantatges, són preliminars o inexistents els treballs que utilitzen aquesta aplicabilitat, no sabent amb exactitud la manera en la que dites variables poden ajudar-nos a obtenir informació de tipus ecològic de manera òptima.

9. Conclusions finals

La mesura de dades en continu amb sondes han possibilitat que les mesures de metabolisme ecosistèmic de forma diària siguin cada cop més acurades i assequibles. Així, en els presents i futurs estudis a nivell d'ecosistema s'està considerant una eina fonamental i molt necessària de cara a la situació climàtica i d'impactes ambientals que vivim al planeta. Les llacunes costaneres són uns ecosistemes que juguen un paper fonamental amb unes característiques físiques, químiques i biològiques úniques, però que lamentablement es troben en força retrocés degut a la transformació antropogènica del paisatge i del clima, entre altres. Així, en aquest manual es proporciona informació necessària per estimar el metabolisme en llacunes costaneres proporcionant detalls del material necessari, les variables a mesurar i el *software* que pot resultar d'utilitat basant-nos en els estudis que s'estan realitzant a la Pletera i al PECT. Juntament amb el manual es proporciona una carpeta anomenada *arxiu_materialPECT* on es troba el material suplementari que es menciona al manual per tal de proporcionar amb la major claredat el funcionament del *software* que es presenta.

10. Bibliografia i fonts de consulta suplementàries

APHA, 2005. Standard methods for the examination of water and wastewater, 21st ed. Published jointly by the American Public Health Association, the American Water Works Association and the Water Environment Federation, Washington, D. C.

Benson, B.B., Krause, D., 1984. The concentration and isotopic fractionation of oxygen dissolved in freshwater and seawater in equilibrium with the atmosphere. *Limnology and Oceanography* 29, 620–632. <https://doi.org/10.4319/lo.1984.29.3.0620>

Bas-Silvestre, M., Quintana, X. D., Compte, J., Gascón, S., Boix, D., Antón-Pardo, M. and Obrador, B., 2020. Ecosystem metabolism dynamics and environmental drivers in Mediterranean confined coastal lagoons, *Estuarine Coastal and Shelf Science*, 245, 106989. <https://doi.org/10.1016/j.ecss.2020.106989>

Cole, J.J., Caraco, N.F., 1998. Atmospheric exchange of carbon dioxide in a low-wind oligotrophic lake measured by the addition of SF₆. *Limnology and Oceanography* 43, 647–656.

Gallegos, C. L., G. M. Ilornberger, and M. G. Kelly., 1977. A model of river benthic algal photosynthesis in response to rapid changes in light¹. *Limnology and Oceanography* 22, 226-233.

Giling, D.P., Staehr, P.A., Grossart, H.P., Andersen, M.R., Boehrer, B., Escot, C., Evrendilek, F., Gómez-Gener, L., Honti, M., Jones, I.D., Karakaya, N., Laas, A., Moreno-Ostos, E., Rinke, K., Scharfenberger, U., Schmidt, S.R., Weber, M., Woolway, R.I., Zwart, J.A., Obrador, B., 2017. Delving deeper: Metabolic processes in the metalimnion of stratified lakes. *Limnology and Oceanography* 62, 1288–1306. <https://doi.org/10.1002/lno.10504>

Grace, M.R., Giling, D.P., Hladyz, S., Caron, V., Thompson, R.M., Mac Nally, R., 2015. Fast processing of diel oxygen curves: Estimating stream metabolism with BASE (BAYesian Single-station Estimation). *Limnology and Oceanography: Methods* 13, e10011. <https://doi.org/10.1002/lom3.10011>

Grace, M.R. and Imberger, S.J., 2006. Stream Metabolism: Performing & Interpreting Measurements. Water Studies Centre Monash University, Murray Darling Basin Commission and New South Wales Department of Environment and Climate Change. 204 pp. <http://www.sci.monash.edu.au/wsc/docs/tech-manual-v3.pdf>.

Odum, H.T., 1956. Primary Production in Flowing Waters. *Limnology and Oceanography* 1, 102–117. <https://doi.org/10.4319/lo.1956.1.2.0102>

Oliver, R. L., and C. J. Merrick. 2006. Partitioning of river metabolism identifies phytoplankton as a major contributor in the regulated Murray River (Australia). *Freshwater Biology* 51, 1131-1148.

Sager, J.C., McFarlane, J.C., 1997. Radiation, in: Langhans, R.W., Tibbitts, T.W. (Eds.), *Growth Chamber Handbook*. Ames Iowa State University, Ames, IA, pp. 1–30.

Staehr, P.A., Bade, D.L., Van de Bogert, M.C., Koch, G.R., Williamson, C.E., Hanson, P.C., Cole, J.J., Kratz, T.K., 2010. Lake metabolism and the diel oxygen technique: State of the science. *Limnology and Oceanography: Methods* 8, 628–644. <https://doi.org/10.4319/lom.2010.8.0628>

Staehr, P.A., Testa, J.M., Kemp, W.M., Cole, J.J., Sand-Jensen, K., Smith, S.V., 2012. The metabolism of aquatic ecosystems: history, applications, and future challenges. *Aquatic Sciences* 74, 15-29.

Wanninkhof, R.H., 1992. Relationship between wind speed and gas exchange. *Journal of Geophysical Research* 97, 7373–7382.

Wilson, H. L., Ayala, A. I., Jones, I. D., Rolston, A., Pierson, D., de Eyto, E., Grossart, H.-P., Perga, M.-E., Woolway, R. I., Jennings, E., 2020. Variability in epilimnion depth estimations in lakes. *Hydrology and Earth System Sciences*, 24(11), 5559-5577. <https://doi.org/10.5194/hess-24-5559-2020>

11. Annex

11.1. SCRIPT 1 BASE

L'estimació del metabolisme es porta a terme amb el model BASE, que està compost de dos *scripts*. A continuació, es copia el primer *script* que es el que deu obrir-se i modificar-se en *R* per poder fer córrer les ordres de càlcul de les taxes metabòliques. El seu ús requerirà de certa familiarització amb *R*.

Aquest *script* el podem trobar a la carpeta *arxius_manualPECT*, en la subcarpeta *BASE*, amb el nom *Call_BASE_v2.3*.

A continuació es copia el *script* però cal tenir present que les referències a les línies del *script* del manual no es correspondran amb aquests números de línia sinó amb els de l'*R*.

BAYesian Single-station Estimation (BASE)

Grace et al. 2015 L&O: Methods

##MODIFICACIONS PER MARIA BAS AMB L'IDENTIFICADOR ##MARIA (ENGLISH VERSION)

SCRIPT 1

required packages (must be downloaded and installed prior to running the model for the first time)

install.packages("coda") ##run this line for installing the package (only the first time using the model)

install.packages("R2jags") ##run this line for installing the package (only the first time using the model)

install.packages("zoo") ##run this line for installing the package (only the first time using the model)

install.packages("lattice") ##run this line for installing the package (only the first time using the model)

library(coda)

library(R2jags)

library(zoo)

library(lattice)

##MARIA: I deleted K as a parameter (and all the characters related to k) and also ER.K.cor;

##changes to set K as a VARIABLE are marked below (with ##MARIA sign). Also in the JAGS code (SCRIPT 2)

#-----

(A) SET LOCATION OF 'BASE' FOLDER (e.g. "C:/Desktop/Analysis")

directory <- "C:/Users/maria/Desktop" # example

```

#-----

# (B) SET MEASUREMENT INTERVAL (SECONDS) (must be the same for all files in a run)
interval <- 600

#-----

# (C) MCMC settings
n.iter <- 40000
n.burnin <- n.iter*0.5

#-----

# (D) OPTIONAL - SET SMOOTHING BEHAVIOUR
# Dissolved oxygen data (fast Fourier transform)
# Filter out this proportion of high-frequency fluctuations (0 = no smoothing)
smooth.DO <- 0.0 # proportion
# PAR data (moving average)
smooth.PAR <- FALSE # logical

#-----

#####
#####

# do NOT need to alter below here

# ##MARIA: HOWEVER, HAVE A LOOK AT LINES 140,163,166 & 170 TO SEE POSSIBLE
MODIFICATIONS DEPENDING

# ON SYSTEM CHARACTERISTICS

#####
#####

start.time<-NULL; start.time<-Sys.time()

# Other functions

smooth5 <- function(x) (rollapply(x, 5, mean, na.rm=T,align="center")) # moving average of 5
time intervals

# Data input and set up output table dataframes
filenames<-list.files(file.path(directory,"BASE/input"))

```

```

# Set up output tables

output.table<-NULL

output.table<-data.frame(File=character(),      Date=character(),      GPP.mean=double(),
GPP.sd=double(), GPP.median=double(), ER.mean=double(),

      ER.sd=double(), ER.median=double(), NEP.mean=double(), NEP.sd=double(),
NEP.median=double(), PR.mean=double(),

      PR.sd=double(), PR.median=double(), theta.mean=double(), theta.sd=double(),
theta.median=double(), A.mean=double(),

      A.sd=double(), A.median=double(), p.mean=double(), p.sd=double(),
p.median=double(), R2=double(), PPP=double(), rmse=double(), rmse.relative=double(),

      mrl.fraction=double(), convergence.check=double(), A.Rhat=double(),

      theta.Rhat=double(), p.Rhat=double(), R.Rhat=double(), GPP.Rhat=double(),
DIC=double(), pD=double(),

      smooth.DO=double(),

      stringsAsFactors=FALSE)

instant.rates<-data.frame(File=character(), Date=character(), interval=integer(),

      tempC=double(), I=double(), GPP.instant=double(), ER.instant=double(),
##MARIA: I introduced K as a variable

      stringsAsFactors=FALSE)

# Analyse files sequentially
for (fname in filenames) {

  data<-read.csv(file.path(directory,"/BASE/input/",fname), head=T) # read next file

  seconds<-86400

  N = nrow(data)
  x = 0:(N-1)

  # check dates for "/" and replace with "-"
  data$Date <- gsub("/", "-", data$Date)

  ## Smoothing data

  plot.days <- 2 # number of consecutive days to plot for the smoothing plot

```



```

if(smooth.DO > 0) {

  # fast Fourier transform smoothing - low pass filter
  DO.fft = fft(data$DO.meas)
  inx_filter = floor(N/2*(1-smooth.DO))
  filter = rep(1, N)
  filter[inx_filter:(N-inx_filter)] = 0
  DO.fft_filtered = filter * DO.fft
  data$DO.smooth <- Re( fft( DO.fft_filtered, inverse=TRUE) / N )
  noise <- data$DO.meas - data$DO.smooth

  limit <- (seconds/interval) * plot.days

  jpeg(file=file.path(directory,"BASE/output/validation      plots",      paste0(fname,
  "_DO_smoothing.jpg")), width=1200, height=600, pointsize=20, quality=400)

  plot(data$DO.meas[1:limit], typ='l', col='grey', ylab="DO concentration", xlab="Timesteps",
  lwd=4)

  points(noise[1:limit]+mean(data$DO.meas[1:limit]), typ='l', col="blue", lwd=2)
  points(data$DO.smooth[1:limit] , typ='l', col="red", lwd=2)

  legend("topleft", legend=c("Measured", "FFT smooth", "High-frequency noise (centered)"),
  col=c("grey", "red", "blue"), lwd=c(3,2,2), bty='n')

  graphics.off()
}

if(smooth.PAR == T) {

  data$I.smooth<-c(data$I[1:2],smooth5(data$I),data$I[nrow(data)-1],data$I[nrow(data)]) #
  moving average over 5 time intervals

  jpeg(file=file.path(directory,"BASE/output/validation      plots",      paste0(fname,
  "_PAR_smoothing.jpg")), width=1200, height=600, pointsize=20, quality=400)

  plot(data$I[1:limit], typ='l', col='grey', ylab="DO concentration", xlab="Timesteps", lwd=4)
  points(data$I.smooth[1:limit] , typ='l', col="red", lwd=2)

  legend("topleft", legend=c("Measured", "Smoothed"), col=c("grey", "red"), lwd=c(3,2),
  bty='n')
}

```

```

graphics.off()

}

# Select dates
data$Date <- factor(data$Date, levels = unique(data$Date))
dates <- unique(data$Date)
n.records <- tapply(data$Date, INDEX=data$Date, FUN=length)
dates <- dates[n.records == (seconds/interval)] # select only dates with full days

## Analyse days sequentially
for (d in dates)
{
  data.sub <- data[data$Date == d,]

  ##MARIA:
  ##NEW SECTION to calculate "OUR" gas exchange with the atmosphere or "K" calculation
  wind <- data.sub$wind
  windheight<- 10 ##10 by default if u10 has been calculated previously, in meters
  alfa<- 1.4125 * (windheight^(-0.15))
  DO <- data.sub$DO.meas
  DOsat <- data.sub$DOsat
  tempC<- data.sub$tempC
  Zmix <- data.sub$Zmix
  wind10<-NA
  DOeq<-NA
  k600<-NA
  Sc<-NA
  kO2<- NA
  FO2<-NA
  KO2<-NA

```

```

K<-NA

# wind (m/s) 10m
wind10<- wind * alfa

# DOeq

DOeq<- (DO*100)/DOsat

#k600 #Cole and Caraco (1998)
k600<-(2.07+0.215*(wind10^1.7))/100

#Sc
Sc<- 1953.4-(128*tempC)+(3.9918*tempC^2)-(0.050091*tempC^3) #for seawater,
following Wanninkhof, 1992
#Sc<- 1800.6-(120.1*tempC)+(3.7818*tempC^2)-(0.047608*tempC^3) # for freshwater,
following Wanninkhof, 1992

#K02
k02 <- k600*((Sc/600)^(-2/3))

#K
FO2<- k02/Zmix
K<- (FO2/3600)*600

# Define data vectors
num.measurements <- nrow(data.sub)
tempC <- data.sub$tempC
salinity <-data.sub$salinity
atmo.pressure <- data.sub$atmo.pressure
K<-K ##MARIA: defining K as a variable
DO.meas <- if(smooth.DO > 0) data.sub$DO.smooth else data.sub$DO.meas

```

```

PAR <- if(smooth.PAR == TRUE) data.sub$I.smooth else data.sub$I

# Initial values

# Set these to something sensible if the model is becoming stuck in a bad parameter
space

# These values here are expressed per timestep, not per day. Divide desired initial K (/day)
by the number of timesteps in a day, as shown in default below

#inits <- function()      {      list(K= 2 / (86400/interval) ) }

# Different random seeds

kern=as.integer(runif(1000,min=1,max=10000))

iters=sample(kern,1)

n.chains <- 3

n.thin <- 10

data.list <-
list("num.measurements","interval","tempC","DO.meas","PAR","salinity","atmo.pressure","K",
"DOeq") ##MARIA: I put K in the input data as a variable

# Define monitoring variables

params=c("A","R","p","theta","tau","ER","GPP","NEP","PR","sum.obs.resid","sum.ppa.re
sid","PPfit","DO.modelled","gppts","erpts")

## Call jags ##

# Set debug = T below to inspect each file for model convergence

# (inspect the main parameters for convergence using bgr diagrams, history, density and
autocorrelation)

metabfit=NULL

metabfit <- do.call(jags.parallel,
                    list(data=data.list,      parameters.to.save=params,      model.file      =
"BASE_metab_model_v2.3.txt",
                        n.chains = n.chains, n.iter = n.iter, n.burnin = n.burnin,
                        n.thin = n.thin, n.cluster= n.chains, DIC = TRUE,

```

```

working.directory = file.path(directory, "/BASE"), jags.seed = 123, digits=5))

##MARIA: I did not put inits in here

# print(metabfit, digits=2) # to inspect results of last metabfit

## diagnostic summaries
# Rhat (srf) test
srf<- metabfit$BUGSoutput$summary[,8]
Rhat.test <- NULL
Rhat.test <- ifelse(any(srf>1.1, na.rm=T)==TRUE,"Check convergence", "Fine")

# Check for convergence and update once if required
if(Rhat.test == "Check convergence") {
  recompile(metabfit)
  metabfit <- update(metabfit, n.iter=n.iter)
}

# Rhat (srf) test - second round in case metabfit is updated
srf<- metabfit$BUGSoutput$summary[,8]
Rhat.test <- NULL
Rhat.test <- ifelse(any(srf>1.1, na.rm=T)==TRUE,"Check convergence", "Fine")
##

# autocorr test
metabfit.mcmc<-as.mcmc(metabfit)
ac.lag1 <- coda::autocorr.diag(metabfit.mcmc, lags = 1)
auto.corr.test <- NULL
auto.corr.test <- ifelse(any(abs(ac.lag1)>0.1, na.rm=T)==TRUE,"Check ac", "ac OK")

PPP <- metabfit$BUGSoutput$summary["PPfit","mean"] # posterior predictive p-value

```

```

DO.mod.means <- metabfit$BUGSoutput$mean$DO.modelled
DO.mod.sd <- metabfit$BUGSoutput$sd$DO.modelled

R2 = cor(DO.mod.means,DO.meas)^2
rmse = sqrt(sum((metabfit$BUGSoutput$mean$DO.modelled-
DO.meas)^2)/length(DO.meas))
post.mean.dev <- metabfit$BUGSoutput$mean$deviance
pD <- metabfit$BUGSoutput$pD
DIC <- metabfit$BUGSoutput$DIC

DO.lag<-DO.meas[2:length(DO.meas)]-DO.meas[1:(length(DO.meas)-1)]
ptpvar <- sqrt((sum((DO.lag)^2)/(length(DO.meas)-1))) # point to point variation
rmse.relative <- rmse / ptpvar

diff<-metabfit$BUGSoutput$mean$DO.modelled-DO.meas
mrl.max<-max(rle(sign(as.vector(diff)))$lengths)
mrl.fraction<-max(rle(sign(as.vector(diff)))$lengths)/length(DO.meas) # proportion of
largest run

#ER.K.cor <- cor(metabfit$BUGSoutput$sims.list$ER,metabfit$BUGSoutput$sims.list$K)
# plot(metabfit$sims.list$ER ~ metabfit$sims.list$K)

# insert results to table and write table
result <- c(as.character(fname), as.character(d), metabfit$BUGSoutput$mean$GPP,
metabfit$BUGSoutput$sd$GPP, metabfit$BUGSoutput$median$GPP,
metabfit$BUGSoutput$mean$ER, metabfit$BUGSoutput$sd$ER,
metabfit$BUGSoutput$median$ER, metabfit$BUGSoutput$mean$NEP,
metabfit$BUGSoutput$sd$NEP, metabfit$BUGSoutput$median$NEP,
metabfit$BUGSoutput$mean$PR, metabfit$BUGSoutput$sd$PR,
metabfit$BUGSoutput$median$PR, metabfit$BUGSoutput$mean$theta,
metabfit$BUGSoutput$sd$theta, metabfit$BUGSoutput$median$theta,
metabfit$BUGSoutput$mean$A, metabfit$BUGSoutput$sd$A,
metabfit$BUGSoutput$median$A, metabfit$BUGSoutput$mean$p,
metabfit$BUGSoutput$sd$p, metabfit$BUGSoutput$median$p,

```

```

        R2,      PPP,      rmse,      rmse.relative,      mrl.fraction,      Rhat.test,
metabfit$BUGSoutput$summary["A",8]      ,      metabfit$BUGSoutput$summary["theta",8],
metabfit$BUGSoutput$summary["p",8],      metabfit$BUGSoutput$summary["R",8],
metabfit$BUGSoutput$summary["GPP",8], DIC, pD, smooth.DO)

output.table[nrow(output.table)+1,] <- result

write.csv(output.table, file=file.path(directory,"BASE/output/BASE_results.csv")) #
output file overwritten at each iteration

# insert results to instantaneous table and write

instant.result <- data.frame(File=as.character(rep(fname,seconds/interval)),
Date=as.character(rep(d,seconds/interval)),interval=1:(seconds/interval),

tempC=tempC, l=PAR,

GPP.instant=as.vector(metabfit$BUGSoutput$mean$gppts),

ER.instant=as.vector(metabfit$BUGSoutput$mean$erpts),

stringsAsFactors = FALSE)

instant.rates[(nrow(instant.rates)+1):(nrow(instant.rates)+(seconds/interval)),] <-
instant.result

write.csv(instant.rates, file=file.path(directory,"BASE/output/instantaneous
rates/instantaneous_rates.csv")) # output file name

# diagnostic traceplots and scatterplots

jpeg(file=file.path(directory,"BASE/output/validation plots", paste0(substr(fname,
1,(nchar(fname)-4)),"_", as.character(d), "_1_trace_", gsub(":", "", Sys.time()), ".jpg")),
width=1200, height=1200, pointsize=30, quality=300)

traceplot(metabfit, varname=c('A','p','R','theta'), ask=FALSE, mfrow=c(3,3),
mar=c(2,2,0,8), new=FALSE)

plot(1:num.measurements,DO.mod.means, type="l",lwd=2, ylim=c(min(DO.mod.means-
DO.mod.sd)-0.5,max(DO.mod.means+DO.mod.sd)+0.5), xlab="Timestep")

points(1:num.measurements,DO.meas,pch=1,xlab="Timestep", col="grey60", cex=0.75)

points(1:num.measurements,DO.mod.means+DO.mod.sd, type="l", lty=2)

points(1:num.measurements,DO.mod.means-DO.mod.sd, type="l", lty=2)

legend(x="topleft", legend=c("DO meas or smoothed", "DO modelled"), pch=c(1,NA),
lty=c(NA,1), col=c("grey60", "black"), cex=0.6, bty='n')

```

```

plot(1:num.measurements,tempC,pch=1,xlab="Timestep" , typ='p')

plot(1:num.measurements,PAR,pch=1,xlab="Timestep" , typ='p')

graphics.off()

# diagnostic density plots

jpeg(file=file.path(directory,"BASE/output/validation   plots",   paste0(substr(fname,
1,(nchar(fname)-4)),"_",   as.character(d),   "_2_density_",   gsub(":", "", Sys.time()),   ".jpg")),
width=1200, height=1200, pointsize=30, quality=300)

print(lattice::densityplot(metabfit.mcmc[,c("theta", "p", "A", "ER", "GPP"))))

graphics.off()

}

}

end.time<-NULL; end.time<-Sys.time()

end.time-start.time

```

11.2. SCRIPT 2 BASE

L'estimació del metabolisme es porta a terme amb el model BASE, que està compost de dos *scripts*. A continuació, es copia el segon *script* que es pot modificar fent servir tant l'*R* com qualsevol editor de text. Aquest *script 2* no caldrà fer-lo córrer amb *R*, sinó que s'executarà amb JAGS en un segon pla, un cop fem córrer el *script 1* amb *R*.

Aquest *script* el podem trobar a la carpeta *arxius_manualPECT*, en la subcarpeta *BASE*, amb el nom *BASE_metab_model_v2.3*.

A continuació es copia l'*script* però cal tenir present que les referències a les línies de l'*script* del manual no es correspondran amb aquests números de línia sinó amb els de l'*R*.

Bayesian Single-station Estimation (BASE)

Grace et al. 2015 L&O: Methods

##MODIFICACIONES PER MARIA BAS AMB L'IDENTIFICADOR ##MARIA (ENGLISH VERSION)

#SCRIPT 2

model


```

{

# PRIORS

##MARIA: I deleted "K" as a parameter

#-----

# (Z) Set estimation of theta and p parameters:

# (Z1) theta and p (effectively) fixed - xx just makes them stochastic
#p <- 1.0
#theta <- 1.07177

#(Z2) treat theta and p as estimable parameters
theta ~ dnorm(0.0,0.25)T(1.0,1.3)
p ~ dnorm(0.0,0.25)T(0.3,1.0)

#-----

## DO NOT ALTER BELOW HERE

A ~ dnorm(0,0.25)T(0,)
R ~ dnorm(0,0.25)T(0,)

tau~dgamma(1,0.001)

seconds <- 24 * 60 * 60

for (i in 1:num.measurements)
{
kelvin[i] <- 273.15 + tempC[i]
}
}

```

```
# correction for salinity #MARIA: We DO NOT perform the salinity corrections here,
check the corresponding script
```

```
S1[i] <- 157570.1 / kelvin[i]
```

```
S2[i] <- -6.6423080E7 / (kelvin[i] * kelvin[i])
```

```
S3[i] <- 1.2438E10 / pow(kelvin[i],3)
```

```
S4[i] <- -8.621949E11 / pow(kelvin[i],4)
```

```
sal.factor[i] <- -1.0*salinity[i]*(0.017674-
10.754/kelvin[i]+2140.7/(kelvin[i]*kelvin[i]))
```

```
DOsalinity.corr[i] <-exp(-139.34411+S1[i]+S2[i]+S3[i]+S4[i]+sal.factor[i])
```

```
# correction for atmospheric pressure #MARIA: We DO NOT perform the salinity
corrections here, check the corresponding script
```

```
alpha[i] <- 0.000975-0.00001426*kelvin[i]+0.00000006436*pow(kelvin[i],2)
```

```
beta[i] <- exp(11.8571-3840.7/kelvin[i]-216961/pow(kelvin[i],2))
```

```
gamma[i] <- ((1-beta[i]/atmo.pressure[i]) / (1-beta[i])) * ((1-
alpha[i]*atmo.pressure[i])/(1-alpha[i]))
```

```
DO.sat[i] <- DOsalinity.corr[i]*atmo.pressure[i]*gamma[i]
```

```
}
```

```
temp.ave <- mean(tempC[])
```

```
#Aprime <- A # no cut in jags
```

```
#pprime <- p # no cut in jags
```

```
#gppts[num.measurements] <- 0 #updated
```

```
# for posterior predictive assessment and goodness of fit evaluation
```

```
obs.resid[num.measurements] <- 0
```

```

ppa.resid[num.measurements] <- 0

# DO modelled
zz ~ dnorm(0,1000000)
DO.modelled[1] <- DO.meas[1] + zz # make monitorable

for (i in 1:(num.measurements-1))
{
  # estimating primary production
  # gppts[i] <- Aprime*pow(PAR[i],pprime) # Grace et al 2015
  # gppts[i] <- PAR[i] / (P1 + P2*PAR[i]) # alternate parameterisation

  DO.meas[i+1] ~ dnorm(DO.modelled[i+1], tau)
  DO.modelled[i+1] <- DO.modelled[i]
                    + A * pow(PAR[i],p)

                    - R * (pow(theta,(tempC[i]-temp.ave)))
                    + K[i] * (DOeq[i]-DO.modelled[i])
                    ##MARIA: Made K as a variable such as Ds in BEDLIM

  # posterior predictive assessment nodes #

  # plausible sampled value
  DO.sampled.fit[i] ~ dnorm(DO.modelled[i], tau)

  # squared residuals
  obs.resid[i] <- pow((DO.meas[i] - DO.modelled[i]),2)
  ppa.resid[i] <- pow((DO.sampled.fit[i] - DO.modelled[i]),2)

}

```

```

# for posterior predictive assessment and goodness of fit evaluation

sum.obs.resid <- sum(obs.resid[])
sum.ppa.resid <- sum(ppa.resid[])
PPfit <- step(sum.obs.resid - sum.ppa.resid)

# Useful calculations
ER <- R * (seconds/interval)
GPP <- sum(gppts[])
NEP <- GPP - ER

PR <- GPP / ER

for (i in 1:num.measurements)
{
gppts[i] <- A * pow(PAR[i],p)
erpts[i] <- R * (pow(theta,(tempC[i]-temp.ave)))
}

##MARIA: I deleted the K.day
}

```

11.3. SCRIPT CORRECCIÓ D'OXIGEN DISSOLT

Aquest *script* es proporciona per transformar valors de conductivitat en salinitat i realitzar les correccions corresponents de l'oxigen per salinitat i pressió atmosfèrica. El seu ús requerirà de certa familiarització amb *R*.

El nom de l'arxiu a la carpeta *arxius_manualPECT* és *correccio_oxigen* i deu obrir-se amb *R*.

A continuació es copia el *script* però cal tenir present que les referències a les línies de l'*script* del manual no es correspondran amb aquests números de línia sinó amb els de l'*R*.

##CONDUCTIVITY - SALINITY CONVERSION & OXYGEN CORRECTIONS

```

##### FIRST STEP
#####

```

```

##First step to convert specific conductivity into salinity for the oxygen correction

```

```
##file (csv) with specific conductivity values. The name of the variable (column) should be called "conduct". Also must contain
```

```
##a variable called "datetime" in format: aaaa-mm-dd hh:mm:ss
```

```
conductivity <- read.csv("C:/Users/maria/Desktop/Maria_dell/Doctorat/DADES/prova2.csv",  
sep=",") ##keep an eye on changing the source!
```

```
conductivity$datetime <- as.POSIXct(conductivity$datetime,format="%Y-%m-%d  
%H:%M:%S",tz="UTC")
```

```
str(conductivity)
```

```
conduct_mS <- conductivity$conduct
```

```
#if we need to convert from mS/cm (CTD-diver measurements) to uS/cm (calculations)
```

```
conduct <- conduct_mS*1000
```

```
##set up a file with reference temperature values or 25 by default below
```

```
ref_temp <- rep(25, length(conductivity$conduct))
```

```
condKCl <- 29035.1640851+861.302764*ref_temp+4.6636947*(ref_temp^2)-  
0.0267243*(ref_temp^3)
```

```
Rt <- +1*(conduct/condKCl)
```

```
S1 <- 0.008-0.1692*(Rt^0.5)+25.3851*Rt+14.0941*(Rt^1.5)-7.0261*(Rt^2)+2.7081*(Rt^2.5)
```

```
S2 <- 0.0005-0.0056*(Rt^0.5)-0.0066*Rt-0.0375*(Rt^1.5)+0.0636*(Rt^2)-0.0144*(Rt^2.5)
```

```
S3 <- +1*(ref_temp-15)/(1+(0.0162*(ref_temp-15)))
```

```
salinity <- ifelse(conduct == 0, 0, S1+(S2*S3))
```

```
#####ATTENTION#####  
#
```

```
##DO NOT run twice ##here is doing the same as above but practicing loops
```

```
for(i in 1:length(conduct)){
```

```
  if (conduct[i] == 0){
```

```

    salinity[i] <- 0
  }else{
    salinity[i] <- S1[i]+(S2[i]*S3[i])
  }
}

```

#joining in the same file (data_results) the following variables: datetime, conductivity & salinity

```
data_results <- cbind(conductivity, salinity)
```

```
View(data_results)
```

```
#####
```

SECOND

```
STEP#####
```

#salinity and atmospheric pressure correccions on dissolved oxygen concentration

#"data" file (csv) must contain the following variables (before running the function be sure all the variables have the same

#lenght and there is no NA values): datetime (format: aaaa-mm-dd hh:mm:ss), atmo.pressure (in atm), satdo (in %), temp (in ?C).

#File containing all those variables should be named as "data" and it can be imported as follows.

```
data<-read.csv("C:/Users/maria/Desktop/Maria_dell/Doctorat/DADES/prova.csv", sep=",")
```

```
##keep an eye on changing the source!
```

```
data$datetime <- as.POSIXct(data$datetime,format="%Y-%m-%d %H:%M:%S",tz="UTC")
```

```
str(data)
```

```
View(data)
```

##Merging this file with the one obtained above containing the salinity values

```
data <- merge(data, data_results, all.x= TRUE, all.y = TRUE)
```

```
View(data)
```

```

salinity.correction <- function(data){

  atmo.pressure = data[['atmo.pressure']]
  satdo = data[['satdo']]
  temp = data[['temp']]
  salinity = data[['salinity']]

  #temperature conversion to kelvin to keep on working
  kelvin = 273.15 + temp

  # The salinity correction for the solubility of DO at a given salinity is (Benson and Krause 1984;
  APHA 2005)

  S1 <- 157570.1 / kelvin
  S2 <- -6.6423080E7 / (kelvin^2)
  S3 <- 1.2438E10 / (kelvin^3)
  S4 <- -8.621949E11 / (kelvin^4)
  sal.factor <- -1.0*salinity*(0.017674-10.754/kelvin+2140.7/(kelvin^2))

  DOsalinity.corr <-exp(-139.34411+S1+S2+S3+S4+sal.factor)

  #Correction for atmospheric pressure

  #alpha <- 0.000975-0.00001426*kelvin+0.00000006436*(kelvin^2)

  #beta <- exp(11.8571-3840.7/kelvin-216961/(kelvin^2))

  #gamma <- ((1-beta/atmo.pressure) / (1-beta)) * ((1-alpha*atmo.pressure)/(1-alpha))

  #DO.sat refers to the solubility of DO to the temperature and salinity supplied at equilibrium
  (100%sat)

```

```

DO.sat <- DOsalinity.corr #*atmo.pressure*gamma

##DO.corr refers to the real concentration of the sample with the temperature and salinity
supplied

DO.corr <- DOsalinity.corr * satdo /100

return(DO.corr)

}

```

```

DO.corr <- salinity.correction(data)

write.csv(DO.corr, "DO.corr.csv") ##it will create a csv with the results of interest (DO values
corrected).

```

11.4. SCRIPT CàLCUL TAXES METABÒLIQUES ESTANDARDITZADES

Tal i com es menciona al manual, pot resultar interessant obtenir les taxes metabòliques estandarditzades per evitar els efectes que la llum i/o la temperatura puguin tenir sobre el metabolisme. Així, es proporciona el codi pel càlcul de les taxes i que queda descrit en major detall al manual segons el treball Bas-Silvestre et al. (2020). El seu ús requerirà de certa familiarització amb *R*.

El nom de l'arxiu a la carpeta *arxius_manualPECT* és *calcul_estandarditzades* i deu obrir-se amb *R*.

A continuació es copia el *script* però cal tenir present que les referències a les línies del *script* del manual no es correspondran amb aquests números de línia sinó amb els de l'*R*.

#####Càlcul de GPP i ER estandarditzats per llum i temperatura segons Bas-Silvestre et al., 2020

##Primer, carrega i/o instala els següents packages:

```
install.packages("xlsx")
```

```
library(xlsx)
```

##Carrega la base de dades correcta a la que anomenarem amb el nom 'data'

##la base de dades (.csv) haurà de contindre minim aquestes variables pel funcionament correcte del següent script:

##Date (com a identificador), A.median, l.max, p.median, GPP.mean, theta.median, tempC.mean, ER.mean

##la 'l.max' als estudis de la Pletera (Bas-Silvestre et al., 2020) i del PECT ha quedat fixada en un valor de 2165).

##Canvia la següent ruta (i condicions si es necessari) per la ruta a la base de dades

```
data<-read.csv("C:/Users/maria/Desktop/Maria_dell/Doctorat/CAPITOL1/dades.csv", header = TRUE, sep = ",", row.names = 1)
```

##o

##selecciona la base de dades del clipboard

```
data <- read.table("clipboard",header=T,sep="\t")
```

#####Un cop carregades les dades comencem amb els càlculs

```
attach(data)
```

#GPPmax diària

```
maxGPP<- (A.median*(l.max^p.median))*72
```

##For those calculations, the hours of light was set at 12 (i.e., 72 10-min intervals per day)

#GPP20 (fer servir línia 42 o 44 segons si es preferix la theta estimada pel model (línia 42) o fixada (línia 44))

```
GPP20<- GPP.mean * (theta.median^(20-tempC.mean))
```

```
GPP20fix<- GPP.mean * (1.072^(20-tempC.mean)) ##(set to 1.072, corresponding to Q10 of 2; Wilcock et al. 1998)
```

```
##GPPmax20 (fer servir linea 49 o 51 segons si es preferix la theta estimada pel model (linia 49) o fixada (linia 51))
```

```
maxGPP20<- ((A.median*(l.max^p.median)) * (theta.median^(20-tempC.mean)))^72
```

```
maxGPP20fix_B<- ((A.median*(l.max^p.median)) * (1.072^(20-tempC.mean)))^72 ##(set to 1.072, corresponding to Q10 of 2; Wilcock et al. 1998)
```

```
##ER20 (fer servir linea 56 o 58 segons si es preferix la theta estimada pel model (linia 56) o fixada (linia 58))
```

```
R20<- ER.mean * (theta.median^(20-tempC.mean))
```

```
R20<- ER.mean * (1.072^(20-tempC.mean)) ##(set to 1.072, corresponding to Q10 of 2; Wilcock et al. 1998)
```

```
#####Creacio d'un arxiu de dades amb els resultats anomenat output
```

```
output<- data.frame(Date, GPP.mean, ER.mean, maxGPP, GPP20, maxGPP20, R20)
```

```
write.xlsx (output, "output.xlsx")
```

11.5. SCRIPT GRÀFIQUES DINÀMIQUES

Aquest *script* es proporciona per tal de poder fer gràfiques dinàmiques amb sèries temporals. Aquest tipus de gràfiques permeten navegar a l'usuari a través d'aquestes podent fer *zoom* en moments puntuals o focalitzar-se en mesures puntuals, en cas necessari, proveint una eina interessant per l'anàlisi prèvia de les dades. El seu ús requerirà de certa familiarització amb *R*.

El nom de l'arxiu a la carpeta *arxius_manualPECT* és *grafiques_dinamiques* i deu obrir-se amb *R*.

##GRAFÍQUES DINÀMICS PER SÈRIES TEMPORALS

```
## EXAMPLE FOR THE METEO DATA (STATION, EVERY HOUR)
```

```
## install all these packages if you do not have them yet (just once)
```

```
install.packages("dygraphs")
```

```
install.packages("tidyverse")
```

```
install.packages("xts")
```

```
install.packages("lubridate")
```

```
# Library
```

```
library(dygraphs)
```

```
library(xts)      # To make the conversion data-frame / xts format
```

```
library(tidyverse)
```

```
library(lubridate)
```

```
# Read the data (write your own source)
```

```
data<-read.csv("C:/Users/maria/Desktop/Maria_dell/Doctorat/DADES/Dades  
meteorològiques/Sonda lllum HOB0 (poste)/arxius_ok/lum_meteo.csv", sep =",")
```

```
#have a look at the date before plotting
```

```
View(data)
```

```
str(data)
```

```
# If your time (variable) is currently a factor, you have to convert it to a date-time format!
```

```
#here is one option to do it
```

```
data$date = ymd_hms(data$date)
```

```
str(data)
```

```
# Then you can create the xts format, and thus use dygraph
```

```
#the main thing you have to change in this chunk of code is:
```

#"lllummeteo": your variable (temporal series, for example, light, oxygen, wind...)

#"date": your variable indicating time in date-time format

```
don=xts(x = data$lllummeteo, order.by = data$date)
```

```
dygraph(don) %>%
```

```
  dyOptions(labelsUTC = TRUE, fillGraph=TRUE, fillAlpha=0.1, drawGrid = FALSE,  
  colors="#D8AE5A") %>%
```

```
  dyRangeSelector() %>%
```

```
  dyCrosshair(direction = "vertical") %>%
```

```
  dyHighlight(highlightCircleSize = 5, highlightSeriesBackgroundAlpha = 0.2, hideOnMouseOut =  
  FALSE) %>%
```

```
  dyRoller(rollPeriod = 1)
```

#once obtained, you can navigate through the plot in the R Viewer or export it (image format (not dynamic)

#or Web Page (dynamic, but you will need a browser to open it)).

11.6. SCRIPT INTERPOLACIÓ

Quan es treballa amb una variable que, per qualsevol circumstància, no tenim amb la mateixa freqüència que la resta, podem tractar de realitzar interpolacions per poder seguir fent servir dita variable, sempre i quan no es realitzi un ús inapropiat de la interpolació, per exemple, per emplenar buits excessivament grans, és a dir, durant un gran període de temps, i que possiblement suposarien, un gran biaix entre les dades estimades i les dades reals. A continuació s'ofereix un *script* per la pràctica d'interpolacions simples sobre una variable en la que es tenen NA. El seu ús requerirà de certa familiarització amb R.

Aquest *script* el podem trobar a la carpeta *arxius_manualPECT*, en la subcarpeta BASE, amb el nom *interpolacio*.

```
##INTERPOLACIO LINEAL (emplenem NA d'una variable)
```

```
##en aquest exemple: base de dades (data), variable a tractar (do)
```

```
##activate the zoo library to do the filling gaps with linear interpolation
```

```
library(zoo)
```

```
#set your own data frame to work with
```

```
data<-read.csv("C:/Users/maria/Desktop/data.csv", sep=",")
```

```
str(data)
```

```
View(data)
```

```
#creates a variable with the NA filled with linear interpolation
```

```
data$do.filled <- na.approx(data$do)
```

```
View(data)
```

11.7. TREBALL FI DE GRAU

En relació a les diferents maneres que tenim d'obtenir les dades per a l'estimació del metabolisme (provinents de sondes instal·lades en continu, estacions meteorològiques properes...) s'adjunta el treball fi de grau realitzat per Benavent (2019) en el que s'analitzen les diferents mesures obtingudes des de diferents llocs.

11.8. SONDES I MANUALS D'ÚS

A continuació es mostren les sondes que es fan servir al PECT com a referència de sondes que poden utilitzar-se per la mesura de les variables indicades. També es proporcionen *links* als respectius manuals d'ús.

Mesura de l'oxigen dissolt i temperatura: miniDOT de PME (<https://www.pme.com/products/minidot>). Manual d'ús accessible a <https://www.pme.com/wp-content/uploads/PME-miniDOT-Manual-2021.pdf>.



Figura A1. Sonda miniDOT, d'on s'obtenen les dades d'oxigen i temperatura.

Mesura de la conductivitat i temperatura: CTD-DIVER de vanEssen Instruments (<https://www.vanessen.com/products/data-loggers/ctd-diver/>). Manual d'ús accessible a <https://www.vanessen.com/wp-content/uploads/2022/05/CTD-Diver-DI28x-ProductManual-en.pdf>.



Figura A2. Sonda CTD-Diver, d'on s'obtenen valors de conductivitat i temperatura per obtenir els valors de salinitat necessaris per al càlcul del metabolisme.

Mesura de la pressió atmosfèrica dintre de l'aigua (nivell d'aigua): CERA-DIVER de vanEssen Instruments (<https://www.vanessen.com/products/data-loggers/cera-diver/>). Manual d'ús accessible a <https://www.vanessen.com/images/PDFs/Diver-ProductManual-en.pdf>.



Figura A3. Sonda CERA-Diver, d'on s'obtenen valors de pressió sota l'aigua per obtenir les variacions de nivell de l'aigua.

Mesura de la pressió atmosfèrica fora de l'aigua: BARO-DIVER de vanEssen Instruments (<https://www.vanessen.com/products/data-loggers/baro-diver/>). Manual d'ús accessible a <https://www.vanessen.com/images/PDFs/Diver-ProductManual-en.pdf>.



Figura A4. Sonda BARO-Diver, d'on s'obtenen valors de pressió atmosfèrica de l'àrea d'estudi.

Mesura del vent: Kestrel 5000 de Kestrel Instruments (<https://kestrelinstruments.com/category-kestrel-advanced/kestrel-5000-environmental-meter>). Manual d'ús accessible a <https://kestrelinstruments.com/mwdownloads/download/link/id/12>.



Figura A5. Sonda Kestrel5000, d'on s'obtenen valors de vent de l'àrea d'estudi.

Mesura la llum: HOBO pendant MX2202 de Onset (<https://www.onsetcomp.com/products/data-loggers/mx2202>). Manual d'ús accessible a <https://www.onsetcomp.com/sites/default/files/2022-11/21536-O%20MX2201%20and%20MX2202%20Manual.pdf>.



Figura A6. Sonda HOBO Pendant MX2202, d'on s'obtenen valors de llum necessaris pel càlcul de la radiació fotosintèticament activa.

11.9. VALIDACIÓ I SELECCIÓ DEL MODEL

Tal i com s'explica amb detall a l'apartat 6 del model, serà necessari assegurar-se de que el model ha estimat les taxes metabòliques correctament. Per a això serà indispensable garantir la convergència de les cadenes dels paràmetres estimats (A , R , p , $theta$, per exemple) i el bon ajustament del model. Per realitzar aquesta tasca, es deuen fer servir tota una sèrie de paràmetres tant qualitius com quantitius que proporcionen informació complementaria (Grace et al., 2105). Aquests es mostren en la Taula A1 i A2 de forma bastant clara i senzilla.

Taula A1. Els distints paràmetres i els valors que han de prendre per assegurar la convergència de les cadenes necessària per la validació del model.

ADEQUADA CONVERGÈNCIA DE LES CADENES		
Tipus	Paràmetre	Valor
Qualitatiu	<i>Convergence.check</i>	Fine
Quantitatiu	estadístic Gelman-Rubin (\hat{R})	<1.1; pròxim a 1
Qualitatiu	<i>Validation plots</i>	Cadenes superposades o coincidents com es mostra a la Figures A7 i A9.

Taula A2. Els distints paràmetres i els valors que han de prendre per assegurar el bon ajustament del model necessaris per validar i seleccionar el millor model. (*)És específic de la magnitud del conjunt de dades i s'ha d'avaluar amb models de diferents dies al mateix lloc. S'expressa en relació a la variació punt a punt del conjunt de dades mitjançant els valors de la columna *rmse.relative*.

BON AJUSTAMENT I VALIDACIÓ DEL MODEL		
Tipus	Paràmetre	Valor
Qualitatiu	<i>pD</i>	Valor positiu de <i>pD</i>
Quantitatiu	<i>PPP</i> o <i>PPfit.mean</i>	Entre 0.1 i 0.9 (millors valors prop a 0.5)
Qualitatiu	<i>Validation plots</i> (confirmació visual)	Ajustament bo entre les dades mesurades i les dades estimades pel model com es mostra a la Figures A8 i A9.
Quantitatiu	R^2	>0.4
Quantitatiu	<i>rmse</i>	(*)
Quantitatiu	<i>mrl.fraction</i>	Valors baixos
SELECCIÓ DEL MODEL		
Quantitatiu	<i>Deviance Information Criterion (DIC)</i>	Valor negatiu. Valor més petits, millor model.

11.10. VALIDACIÓ I SELECCIÓ DEL MODEL MITJANÇANT GRÀFIQUES

Com s'ha comentat a l'apartat 6 la validació i selecció del model pot complementar-se amb la utilització de gràfics o el que s'anomenen *validation plots* dels *outputs* del model. Amb aquestes gràfiques es pot veure de manera ràpida i senzilla si el model funciona de forma correcta. Així, a continuació, s'ofereixen distints exemples per explicar els distints casos amb que ens podem trobar. En el primer (Figura A7) s'observa la bona convergència dels paràmetres (A,B,C,D) però baix ajustament del model (E), és a dir, poc ajustament entre les dades observades i modelades (valors baixos d' R^2). En el segon cas (Figura A8), a pesar de que si que s'observa un bon ajustament entre les dades observades i modelades (valors alts d' R^2) (E) la convergència de les cadenes en alguns dels paràmetres no és bona (A,B). En el tercer cas (Figura A9), s'observa tant bona convergència (A,B,C,D) com ajustament (E), assenyalant que eixe dia podria tenir-se en consideració per futurs anàlisi per bon funcionament del model.

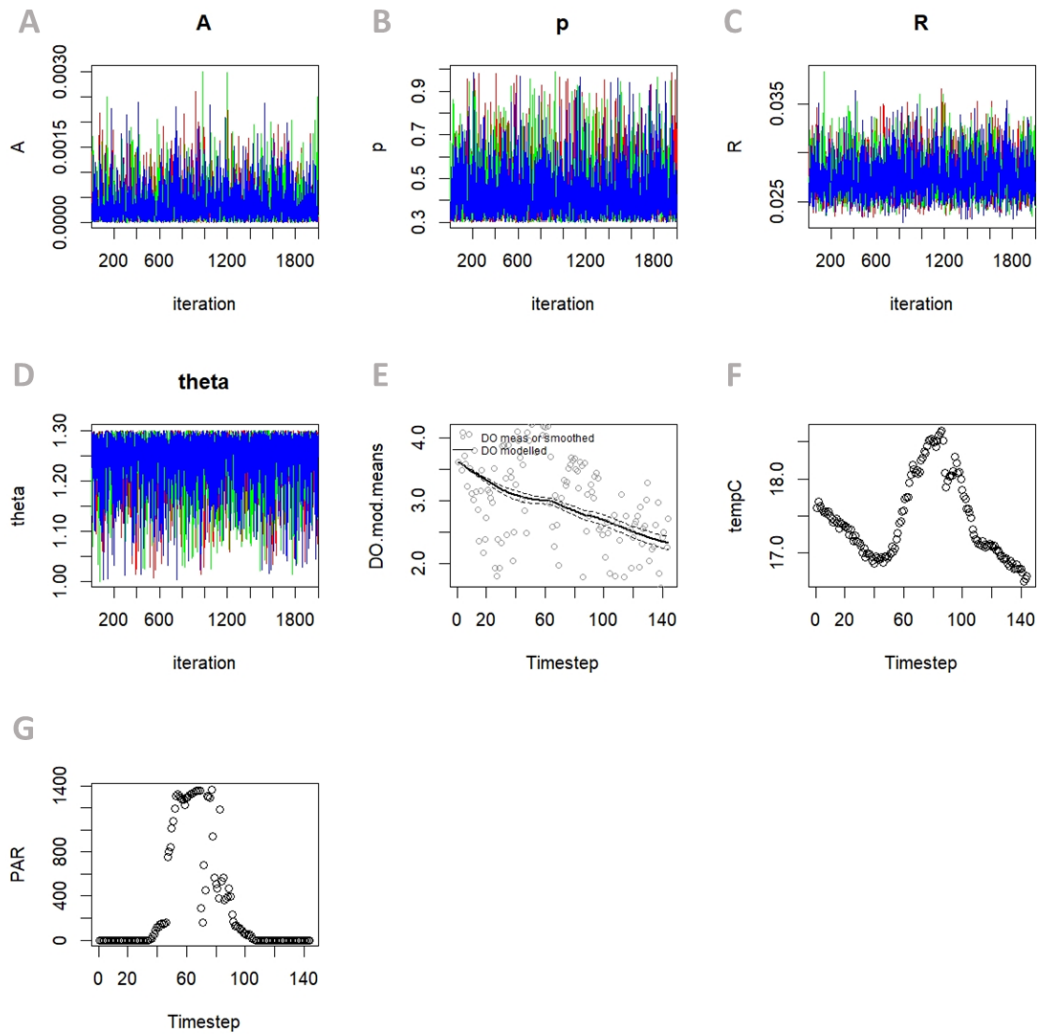


Figura A7. Exemple dels resultats d'un dia descartat de Basses d'en Coll degut a poc ajustament entre dades modelades i observades (E; $R^2 < 0.4$). No obstant, per a aquest dia s'observa bona convergència dels paràmetres A , p , R , θ (A,B,C,D).

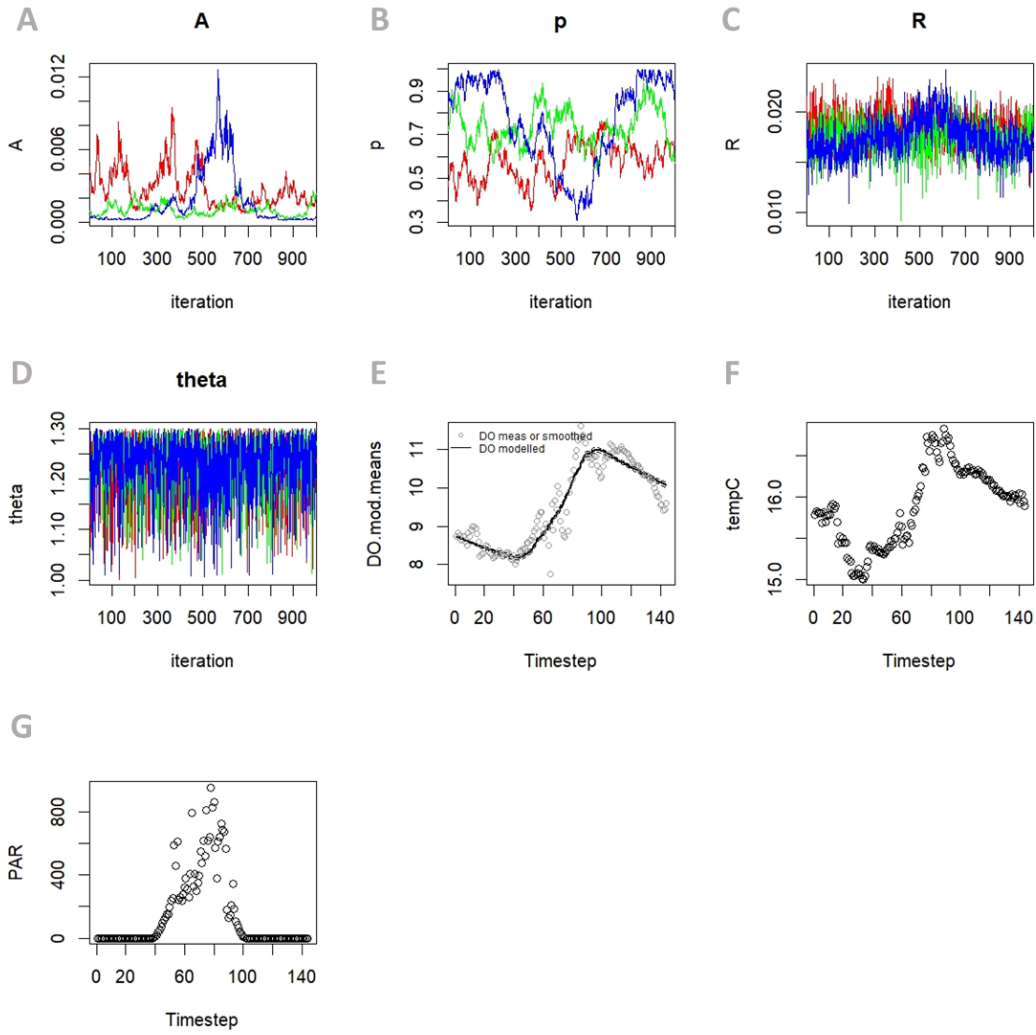


Figura A8. Exemple dels resultats d'un dia descartat de Basses d'en Coll degut a la falta de convergència en els paràmetres A i p (A, B). No obstant, s'observa un bon ajustament entre les dades modelades i observades (E; $R^2 > 0.4$).

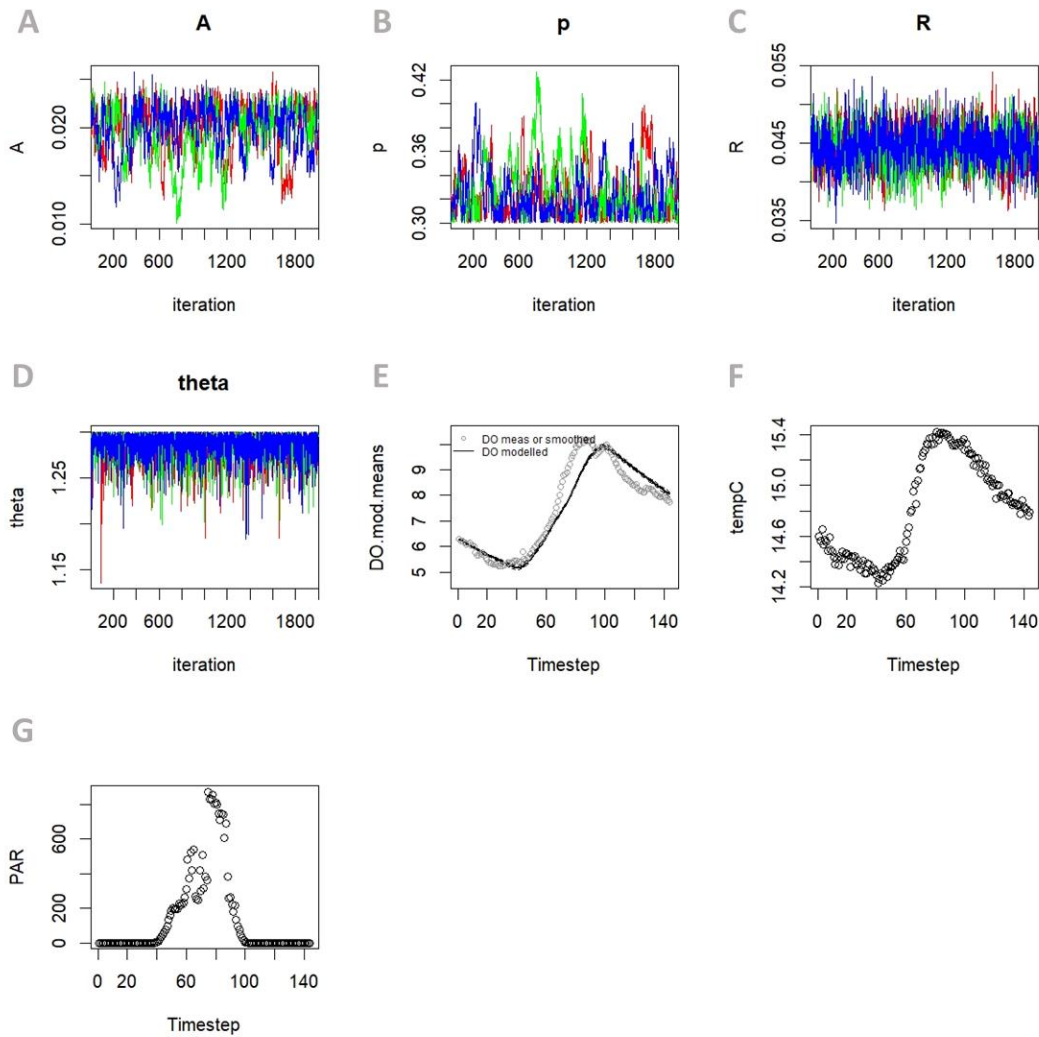


Figura A9. Exemple dels resultats d'un dia seleccionat de Basses d'en Coll per la bona convergència dels paràmetres A , p , R , $theta$ (A,B,C,D) i bon ajustament entre les dades modelades i observades d'oxigen (E; $R^2 > 0.4$).

11.11. EXEMPLE BASE DE DADES PER UTILITZAR EL MODEL BASE (*INPUT*)

Tal i com es comenta al manual (apartat 5), aquí s'ofereix un exemple del format que han de presentar les dades perquè el model funcioni correctament. Cal recordar que l'arxiu deu ser .csv i s'han de respectar les unitats de les variables corresponents que s'especifiquen a l'apartat 3. Per major claredat, es recomana consultar la subcarpeta *BASE_amb_exemple* disponible a la carpeta *arxius_manualPECT*, on a *input* es pot trobar un arxiu de dades anomenat *BC_DB.csv* que serveix d'exemple per la introducció de dades en el format adequat.

	A	B	C	D	E	F
1	Date,Time,I,DOsat,tempC,DO.meas,atmo.pressure,salinity,wind,Zmix					
2	2018-11-01,0:03:00,0,47.84553,12.694,5.048,1,0,1.3,2.075128333					
3	2018-11-01,0:13:00,0,47.459886,12.739,5.002,1,0,1,2.077141667					
4	2018-11-01,0:23:00,0,47.61931,12.694,5.025,1,0,0,2.07775					
5	2018-11-01,0:33:00,0,46.525872,12.712,4.907,1,0,0,2.078175833					
6	2018-11-01,0:43:00,0,47.072876,12.721,4.963,1,0,0,2.0816125					
7	2018-11-01,0:53:00,0,46.987779,12.694,4.958,1,0,0,2.0838875					
8	2018-11-01,1:03:00,0,46.335886,12.756,4.882,1,0,0,2.082858333					
9	2018-11-01,1:13:00,0,46.402023,12.747,4.891,1,0,0,2.084725					
10	2018-11-01,1:23:00,0,45.880891,12.8,4.832,1,0,0,2.0865					
11	2018-11-01,1:33:00,0,45.207393,12.844,4.756,1,0,0,2.087461667					
12	2018-11-01,1:43:00,0,45.63273,12.853,4.801,1,0,0,2.088371667					
13	2018-11-01,1:53:00,0,46.307569,12.756,4.882,1,0,0,2.0896375					
14	2018-11-01,2:03:00,0,45.597443,12.8,4.803,1,0,0,2.090074167					
15	2018-11-01,2:13:00,0,46.033839,12.756,4.853,1,0,0,2.094945833					
16	2018-11-01,2:23:00,0,45.684169,12.774,4.814,1,0,0,2.092775					
17	2018-11-01,2:33:00,0,45.589503,12.783,4.803,1,0,0,2.09275					
18	2018-11-01,2:43:00,0,45.797675,12.765,4.827,1,0,0,2.097558333					
19	2018-11-01,2:53:00,0,46.202133,12.8,4.865,1,0,1.1,2.097788333					
20	2018-11-01,3:03:00,0,46.807816,12.747,4.935,1,0,0,2.097903333					
21	2018-11-01,3:13:00,0,46.23981,12.809,4.869,1,0,0,2.099955					
22	2018-11-01,3:23:00,0,46.457164,12.809,4.891,1,0,0.4,2.102009167					
23	2018-11-01,3:33:00,0,46.837152,12.739,4.939,1,0,0,2.101441667					
24	2018-11-01,3:43:00,0,46.554141,12.721,4.912,1,0,0,2.105074167					
25	2018-11-01,3:53:00,0,46.517583,12.659,4.915,1,0,0.4,2.109441667					
26	2018-11-01,4:03:00,0,46.676738,12.703,4.927,1,0,1.3,2.108313333					
27	2018-11-01,4:13:00,0,47.130119,12.686,4.977,1,0,1,2.1099325					
28	2018-11-01,4:23:00,0,47.120034,12.721,4.973,1,0,0.9,2.110743333					
29	2018-11-01,4:33:00,0,47.421688,12.712,5.005,1,0,1.2,2.114					
30	2018-11-01,4:43:00,0,46.403125,12.739,4.895,1,0,1.7,2.1149775					
31	2018-11-01,4:53:00,0,47.091559,12.703,4.973,1,0,1.2,2.115705					
32	2018-11-01,5:03:00,0,47.195377,12.712,4.983,1,0,0.9,2.118720833					
33	2018-11-01,5:13:00,0,47.459964,12.686,5.014,1,0,0.7,2.120025					
34	2018-11-01,5:23:00,0,46.137547,12.765,4.865,1,0,0,2.120205					
35	2018-11-01,5:33:00,0,45.493775,12.791,4.794,1,0,0.7,2.120525					
36	2018-11-01,5:43:00,0.00418,46.800082,12.65,4.948,1,0,1.1,2.121540833					
37	2018-11-01,5:53:00,0.042180001,45.578793,12.791,4.803,1,0,1.2,2.122121667					
38	2018-11-01,6:03:00,0.71952998,44.482545,12.8,4.687,1,0,0,2.122945833					

Figura A10. Exemple de format de la base de dades que haurà de tenir l'arxiu a la carpeta *input* pel bon funcionament del model. Les dades proporcionades d'exemple han sigut extretes de la base de dades de Basses d'en Coll.

11.12. EXEMPLE RESULTATS DEL MODEL BASE (*OUTPUT*)

A banda de les gràfiques de validació del model, als *output* del model s'obtenen dos tipus d'arxius. El que s'anomena *BASE_results.csv*, com es menciona a l'apartat 6, és en el que s'obtenen les taxes metabòliques diàries i el valors diaris dels diferents paràmetres (*A*, *R*, *p*, *theta*), també dels que es necessiten per validar i seleccionar el model (R^2 , \hat{R} ...). No obstant, de manera complementària també s'obté un arxiu anomenat *instantaneous_rates.csv* en el que s'ofereixen les taxes subdiàries a la mateixa freqüència a la que s'han ofert les dades inicials, és a dir, si a la base de dades d'*inputs* figuren les dades cada 10 minuts, a l'arxiu de taxes instantànies obtindrem les taxes metabòliques amb una freqüència de 10 minuts.

11.13. (FOTOGRAFIES) - EXEMPLES I DETALLS D'INSTAL·LACIÓ I MOSTREIG



Figura A13. Mostreig realitzat a la bassa de l'Escala.

Durant el mostreig no només es recullen dades de tipus fisicoquímic sinó que es recull aigua per anàlisi de nutrients i organismes. A banda, es porta a terme un manteniment i neteja de les sondes de manera continuada per assegurar que les dades no es perdin. A més, realitzant neteges de forma regular s'evita l'acumulació de *fouling* i d'una recollida de dades errònies. En aquesta fotografia s'aprecia la col·locació de les sondes a una zona més o menys central de la llacuna o canal de l'Escala en la que la fondària és màxima.



Figura A14. Detall de les sondes col·locades a la bassa o canal de l'Escala.

En aquesta fotografia es poden apreciar, a grans trets, les diferents estructures instal·lades per poder col·locar el conjunt de sondes per a la recollida de dades en continu. En primer lloc, es disposa d'una primera estructura d'acer inoxidable, de forma cilíndrica que conté 3 tipus de sondes. La sonda d'oxigen (*miniDOT*) i la sonda de conductivitat (*CTD-Diver*) es troben submergides, penjant de dues anelles col·locades a la boia o flotador de color verd. A l'extrem superior de la estructura, es troba col·locada en una petita estructura de fusta i fixada amb claus, la sonda de llum (*HOBO*).

La segona estructura, una mica més complexa, també té forma cònica però amb forats per a permetre l'entrada d'aigua i la mesura del nivell de l'aigua. A la part superior hi ha situada una anella que permet enganxar un fil, també d'acer inoxidable, d'on penja la sonda *CERA-Diver* a dintre del tub per mesurar el nivell de l'aigua. Aquest fil deu ser el suficientment llarg per assegurar que la sonda sempre estigui sota l'aigua i el suficientment curt per evitar errades i que toqui el fons de la llacuna. A aquesta estructura cilíndrica també s'hi troba annexada un pal d'acer inoxidable que al extrem té una estructura per roscar, semblant a un cargol, on es cargola l'estructura inferior de la sonda de vent (*Kestrel5000*).



Figura A15. Detall de les sondes col·locades a la bassa del Ter Vell (Estartit).

Com en el cas anterior, podem apreciar les diferents estructures, col·locades a la part representativa de la llacuna, per mantenir les diferents sondes de mesura en continu. En aquest cas, s'aprecia molt bé l'estructura metàl·lica i de fusta col·locada a l'extrem superior del tub per permetre d'una banda, la instal·lació de la sonda de llum, com, per l'altra, actuar de topall i evitar que la boia es perdi en moments de temporal i pujada sobtada del nivell. La segona estructura, en aquest cas, es troba col·locada, fent servir abraçadores, a una estructura que ja es trobava a la llacuna prèviament.



Figura A16. Mostreig a les Bases d'en Coll.

Com ja s'ha comentat tant al manual com anteriorment, les sondes deurien trobar-se instal·lades en una part representativa de la llacuna. En molts casos, aquesta part és dels punts amb més fondària del sistema aquàtic. Tant pel mostreig com pel manteniment de les sondes es pot fer servir algun *kayak* tant sòlid com inflable, com el que s'observa a la imatge, per acostar-se al punt de mostreig de manera còmoda i segura.