

# Module OM COMPOST

F. Lafolie

## Sommaire

<b>1</b>	<b>Hypothèses</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Equations</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Résolution</b>	<b>2</b>
<b>4</b>	<b>Entrées</b>	<b>4</b>
<b>5</b>	<b>Sorties</b>	<b>4</b>
<b>6</b>	<b>Paramètres du Module</b>	<b>5</b>

## 1 Hypothèses

On décrit la résolution qui est mise en oeuvre dans la plate-forme VSOIL pour les équations décrivant le compostage de résidus organiques. Le modèle est décrit dans l'article : **Zhang et al. 2012. Modelling of organic matter dynamics during the composting process. Waste Management, 32(1): 19-30.** Les équations sont prises dans l'article et répétées ici pour faciliter la lecture. Le modèle considère que les résidus organiques sont répartis dans cinq compartiments : un compartiment soluble à décomposition lente ( $C_1$ ), un compartiment soluble à décomposition rapide ( $C_2$ ), un compartiment hémicellulose ( $C_3$ ), un compartiment cellulose ( $C_4$ ) et un compartiment lignine ( $C_5$ ). La décomposition de ces cinq compartiments se fait selon une loi du premier ordre et alimente un compartiment dit "soluble" ( $C_s$ ) sur lequel se nourrit une biomasse microbienne ou fongique ( $C_b$ ). La biomasse morte devient en partie de la matière humifiée ( $C_{hum}$ ) et le reste se partage entre le pool soluble et le pool dit soluble lent ( $C_1$ ). La décomposition du pool soluble par la biomasse microbienne produit du  $CO_2$ . La croissance de la biomasse obéit à une loi de Monod.

Le module accepte en entrée des apports de compost au cours du temps. Le compost apporté doit donc être caractérisé au moyen des pools décrits ci-dessus.

## 2 Equations

Les équations sont donc les suivantes.

Pour le premier compartiment (soluble lent) on a la décomposition du premier ordre et l'alimentation en provenance de la biomasse morte qui donnent :

$$\frac{dC_1(t)}{dt} = -K_1 C_1(t, z) + m(1 - Y_{cs})\omega C_b(t) \quad (1)$$

avec  $m(s^{-1})$  la constante de temps pour la mortalité de la biomasse,  $\omega$  la fraction de la biomasse morte qui rejoint les pools solubles (le reste est humifié) et  $Y_{cs}$  un paramètre pour la partager entre le pool soluble  $C_s$  et le pool  $C_1$ .

Pour les compartiments  $i = 2, 3, 4, 5$  on a des lois du premier ordre.

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = -K_i C_i(t, z) \quad (2)$$

Pour le compartiment soluble, l'équation s'écrit :

$$\frac{dC_s(t)}{dt} = \sum_{i=1}^5 K_i C_i - \frac{\mu(C_s(t))C_b}{Y} + mY_{cs}\omega C_b(t) \quad (3)$$

La somme correspond à l'alimentation du pool à partir des cinq premiers, le second terme correspond à la perte due à la croissance du compartiment microbien, le troisième correspond à une alimentation en provenance de la biomasse morte.  $Y$  est le rendement d'assimilation du carbone par la biomasse microbienne.  $\mu(C_s)$  est la fonction de Monod qui pilote la croissance de la biomasse en fonction de la disponibilité du substrat  $C_s$ . La fonction est la suivante :

$$\mu(C_s(t)) = \mu_{max} \frac{C_s(t)}{C_s(t) + K_s} f(T)g(\psi) \quad (4)$$

avec  $\mu_{max}(s^{-1})$  la croissance spécifique maximum,  $K_s(kg/kg)$  la constante de demi-saturation, et  $f(T)$  et  $g(\psi)$  des fonctions pour tenir compte de l'effet de la température et du potentiel de l'eau.

Pour la dynamique microbienne, on a l'équation :

$$\frac{dC_b(t)}{dt} = \mu(C_s(t))C_b(t) - mC_b(t) \quad (5)$$

L'équation pour le pool de matière humifiée est simplement

$$\frac{dC_{hum}(t)}{dt} = (1 - \omega)mC_b(t) \quad (6)$$

La production de  $CO_2$  est:  $(1 - Y)\frac{\mu C_b}{Y}$

## 3 Résolution

Les équations sont en partie couplées et non linéaire pour celle décrivant l'évolution de  $C_s$ .

On peut les résoudre en linéarisant, ce qui traite en même temps les problèmes de couplage et de non-linéarité. Dans ce cas on résout les cinq premières

équations par une méthode de Cranck-Nicholson, la variable  $C_b$  dans la première équation est prise au temps précédent. Puis on résoud celle pour  $C_s$  en calculant la fonction  $\mu$  avec  $C_s$  prise au pas de temps précédent et de même pour  $C_b$  qui apparaît dans cette équation. On peut alors résoudre l'équation pour  $C_b$  avec la fonction  $\mu$  calculée comme précédemment. L'évaluation du compartiment humifié et des émissions de  $CO_2$  ne pose pas de problème.

La méthode mise en oeuvre dans VSOIL est une méthode itérative qui permet de traiter en même temps les couplages et les non-linéarités. Elle consiste à résoudre les équations en utilisant comme première estimation de la solution, les valeurs calculées au pas de temps précédent. Les équations pour les pools 1 à 5 sont résolues en premier. Cela permet d'avoir une première estimation de ces pools. L'équation pour le pool soluble (eq. 3) est alors traitée, ce qui permet d'avoir une estimation  $\widehat{C}_s$ . Ensuite on obtient une estimation de la biomasse  $\widehat{C}_b$  en résolvant l'équation 5. Un schéma de Cranck-Nicholson est utilisé chaque fois qu'on a une équation du premier ordre. Ensuite on obtient la quantité humifiée et les flux de  $CO_2$ . Ce processus est répété jusqu'à ce que les variations relatives des estimations successives des différents pools soient plus petites qu'une valeur donnée. Le processus converge très rapidement ; 1 à 2 itérations sont suffisantes. La méthode itérative devient équivalente à la méthode utilisant la linéarisation si le critère de convergence n'est pas contraignant. Les équations sont décrites ci-dessous. L'algorithme a été vérifié par rapport à une solution obtenue avec MathLab.

#### Equation pour le pool soluble lent

L'estimation au temps  $t+dt$  est obtenue par un schéma de Cranck-Nicholson.

$$\widehat{C}_1(t+dt) = \frac{1 - K_1 dt/2}{1 + K_1 dt/2} C_1(t) + m(1 - Y_{cs})\omega C_b(t) \frac{dt}{1 + K_1 dt/2} \quad (7)$$

#### Equation pour les pools : soluble rapide, hemi-cellulose, cellulose et lignine

Les solutions au temps  $t + dt$  sont obtenues avec des schémas de Cranck-Nicholson. Il s'agit bien de solutions et non d'estimations car pour ces pools il n'y a pas de couplage ni de non-linéarité.

$$C_i(t+dt) = \frac{1 - K_i dt/2}{1 + K_i dt/2} C_i(t) \quad (8)$$

où  $i$  désigne l'indice du pool et  $k_i$  la constante de temps associée.

#### Equation pour le pool soluble

Dans ce cas, l'équation ne faisant pas apparaître l'inconnue au second membre, la solution est simplement :

$$C_s(t+dt) = C_s(t) + dt \left( \sum_{i=1}^5 K_i C_i(t+dt) + mY_{cs}\omega \widehat{C}_b \right) - dt \frac{\mu(\widehat{C}_s)}{Y} \widehat{C}_b \quad (9)$$

où  $\widehat{C}_b$  désigne l'estimation courante du pool biomasse. A la première itération c'est la valeur au temps  $t$ . La fonction  $\mu(\widehat{C}_s)$  est calculée selon l'équation 4 avec  $\widehat{C}_s$  qui désigne l'estimation courante de  $C_s$ . Lors de la première itération c'est la valeur au pas de temps précédent qui est utilisée.

#### Equation pour le pool biomasse

On obtient la solution avec un schéma de Cranck-Nicholson.

$$C_s(t + dt) = C_s(t) \frac{1 - k_b dt/2}{1 + k_b dt/2} \quad (10)$$

avec  $k_b = m - \mu(\widehat{C}_s)$

#### Critère d'arrêt des itérations

On calcule le max sur tous les pools de la variation relative de deux estimations successives. Si cette variation est inférieure à un seuil on a convergence. Si on note  $j$  l'indice d'itération, cela se traduit par :

$$\text{Max}_{i=1,7} \frac{\|C_i^{j+1} - C_i^j\|}{\|C_i^{j+1}\|} \leq \epsilon \quad (11)$$

Les paramètres  $K_i$  sont corrigés pour tenir compte de l'effet de la température et du potentiel de l'eau. On utilise les fonctions de VanHoff et d'Andren.

Les paramètres  $K_i$  correspondant à la cellulose et à l'hemi-cellulose sont en plus corrigés pour tenir compte de la proportion de lignine. Le paramètre corrigé est donné par :  $K_i = K_i * \exp(-3.2 f_{lig})$  où  $f_{lig}$  est la fraction de lignine (masse de lignine rapportée à la masse totale des pools *slow*, *fast*, *cellulose*, *hemicellulose* et *lignine*).

On n'a pas mis de contrainte sur le pas de temps dans le codage du module. Les tests faits avec divers pas de temps allant de 60 secondes à 1 heure ne montrent pas de différences significatives. Les résultats sont en parfait accord avec la solution MathLab.

## 4 Entrées

Les entrées du module sont les suivantes :

- **soil bulk density** Masse volumique du sol [ $kg.m^{-3}$ ]
- **soil water matrix potential** Potentiel matriciel de l'eau du sol [ $m$ ]
- **soil temperature** Température du sol [ $K$ ]
- **soil organic fertilizer pools incorporation depth** Profondeur d'incorporation des apports éventuels [ $m$ ]
- **soil organic fertilizer pools surfacic mass** Quantité de compost appliquée. Il s'agit de la masse de chaque pool composant le compost. La somme doit correspondre à la masse de compost appliquée. Voir la définition des pools ci-dessus. [ $kgMS.m^{-2}$ ]
- **soil organic fertilizer pools carbon mass ratio** Fraction de carbone pour chaque pool composant le compost appliqué. [ $kgC.kg^{-1}MS$ ]

## 5 Sorties

Le module produit les variables suivantes. Elles sont toutes des fonctions du temps. Donc le module les calcule à chaque fois qu'il est appelé (cf. pas de temps  $dt$ ). Elles sont soit définies en tous les points du profil soit sans localisation spatiale. Toutes les informations (localisation, type, description, unité) sont disponibles dans l'application VSoil Modules.

- **soil organic matter pool mass ratio** Fraction massique des pools composant le compost. [ $kgC.kg^{-1}sol$ ] **Une valeur initiale doit être fournie pour cette variable**
- **soil organic matter pool decomposition rate** Vitesse de décomposition des pools composant le compost. [ $kgC.kg^{-1}sol.s^{-1}$ ]
- **soil organic matter pool mass ratio profile integrated** Pools composant le compost intégrés sur le profil de sol [ $kgC.m^{-2}$ ]
- **organic matter gas production rate** Production de  $CO_2$  en chaque point du profil de sol. [ $mol.m^{-3}.s^{-1}$ ]
- **organic matter gas production rate profile integrated** Production de  $CO_2$  pour tout le profil de sol. [ $mol.m^{-2}.s^{-1}$ ]
- **organic matter gas production rate profile time integrated** Production de  $CO_2$  pour tout le profil de sol cumulée dans le temps. [ $mol.m^{-2}$ ]

## 6 Paramètres du Module

- **k1**, [ $s^{-1}$ ], Hydrolysis constant of C i=1 (SND-slow)
- **k2**, [ $s^{-1}$ ], Hydrolysis constant of C i=2 (SND-fast)
- **k3**, [ $s^{-1}$ ], Hydrolysis constant of C i=3 (Hcel)
- **k4**, [ $s^{-1}$ ], Hydrolysis constant of C i=4 (CEL)
- **k5**, [ $s^{-1}$ ], Hydrolysis constant of C i=5 (LIG)
- **Y**, [ $s^{-1}$ ] Assimilation yield of organic C available to microbial biomass.
- **Mumax**, [ $s^{-1}$ ], Maximum specific growth rate for microbial biomass .
- **Ks**, [ $kg.kg^{-1}$ ], Saturation constant for Monod kinetic.
- **mB**, [ $s^{-1}$ ], Death constant for microbial biomass.
- **Ycs**, [ $NA$ ], Parameter to split dead biomass between pools C1 and Cs. The fraction  $Y_{cs}$  goes to pool Cs.
- **wbio**, [ $NA$ ], Fraction of dead biomass into biodegradation pools. The remaining goes to humified organic matter pool. This the  $\omega$  parameter in equation 3.
- **tempref**, [ $K$ ], Reference temperature for Van Hoff model.
- **qvanthoff**, [ $NA$ ], Parameters for the vanHoff model.
- **pot\_opt**, [ $m$ ], Optimum potential for Andren model.
- **pot\_min**, [ $m$ ], Minimum potential in Andren model.
- **epsi**, [ $NA$ ], Convergence criteria for resolution of the coupled non linear differential equations.
- **maxiter**, [ $NA$ ], Maximum number of iterations allowed for the resolution of the coupled equation within a time increment.