

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА БИОМАССЫ

Аннотация. В статье представлен подход к математическому моделированию выхода продуктов процесса пиролиза растительной биомассы путем их предсказания в процентном соотношении с помощью классических моделей машинного обучения. Разработаны средства визуализации кривых дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрического анализа. Реализован механизм подсчета теплового эффекта процесса пиролиза.

Ключевые слова: моделирование пиролиза, машинное обучение, пиролиз биомассы, выход продуктов пиролиза, регрессионная модель.

Введение. В последние годы большое внимание уделяется экологическим проблемам, связанным с загрязнением окружающей среды. Пиролиз — это процесс термического разложения материалов в инертной среде. В ходе пиролиза сырья различного происхождения происходит получение твердых, жидких и газообразных продуктов, которые можно использовать в промышленности, энергетике и сельском хозяйстве различным образом [8, 9].

При использовании традиционных численных методов моделирования пиролиза, основанных на решении нелинейных систем физико-химических уравнений [3, 6], требуется значительное количество вычислительных ресурсов и времени. Это связано со множеством химических реакций и физических взаимодействий внутри реактора пиролиза, а также с необходимостью учитывать множество параметров процесса, таких как начальная и конечная температура, элементный состав биомассы, размер частиц, давление и т.д.

Методы машинного обучения позволяют создавать модели, которые обучаются на основе данных натурных экспериментов, выявляя скрытые зависимости и закономерности без необходимости прямого решения сложных уравнений. Благодаря этому достигается существенное сокращение вычислительных затрат — модели машинного обучения способны быстро и эффективно прогнозировать выходные параметры пиролиза: такие как состав продуктов, выход газов, жидких и твердых фракций и энергетические характеристики процесса [1, 4].

Использование машинного обучения обеспечивает гибкость и адаптивность моделей. Они могут быть дообучены или перенастроены при появлении новых данных [2]. Это ускоряет процесс разработки и оптимизации технологических процессов пиролиза. Гибкость особенно важна для промышленных приложений, где требуется оперативное принятие решений и оптимизация параметров процесса в реальном времени.

Применение методов машинного обучения в моделировании пиролиза биомассы снижает вычислительную сложность и затраты [5, 7], повышает точность и надежность прогнозов, что способствует более эффективному процессу переработки биомассы в энергетике и топливной промышленности.

Проблема исследования. В традиционных моделях пиролиза биомассы рассматривается задача прогнозирования динамического изменения соотношения продуктов реакции внутри реактора на каждом этапе процесса. Это требует сложного моделирования кинетики

реакций и учета множества переменных во времени, что значительно усложняет расчеты и увеличивает вычислительные затраты. В ряде практических задач такой детальный динамический прогноз не всегда необходим, и эффективным подходом является использование подхода прогнозирования выхода целевых продуктов пиролиза методами машинного обучения [1, 2, 4, 5, 7].

В связи с вышеперечисленным, стоит задача разработки комплекса программ для моделирования процесса пиролиза растительной биомассы по данным натурных экспериментов.

Материалы и методы. В качестве данных для моделирования процесса путем предсказания выхода конечных продуктов пиролиза в процентном соотношении были использованы данные из открытых источников¹. В качестве моделей для предсказания выхода продуктов пиролиза использовались классические регрессионные методы машинного обучения.

Для построения программного комплекса были выделены ключевые компоненты:

1. Модуль импорта данных.
2. Модуль обучения моделей.
3. Модуль анализа данных.
4. Хранилище предобученных моделей.
5. База данных (БД) параметров экспериментов и характеристик сырья.
6. Визуальный интерфейс.

Модуль импорта данных должен иметь поддержку импорта файлов форматов .csv, .txt, .xlsx с данными термогравиметрии (ТГА) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Модуль обучения моделей отвечает за выбор и обучение моделей машинного обучения для решения задач в рамках моделирования.

Модуль анализа данных выполняет прогнозирование выхода твердых, жидких и газообразных продуктов пиролиза растительной биомассы в процентном соотношении. Также он производит подсчет теплового эффекта, используя результаты ДСК.

Хранилище предобученных моделей содержит ряд обученных моделей для предсказания выхода продуктов пиролиза.

База данных экспериментов и характеристик сырья хранит физические и химические характеристики сырья: влажность, зольность, состав сырья, размер частиц. Также в ней хранятся параметры проведения экспериментов: длительность нагрева, скорость нагрева, виды сырья. БД также хранит результаты экспериментов: выход продуктов в ходе пиролиза, кривые ДСК.

Результаты. В результате был разработан прототип программного комплекса, включающий регрессионные модели и позволяющий прогнозировать с достаточной точностью выход продуктов пиролиза растительной биомассы в % соотношении (рис. 1).

¹ <https://github.com/dazhaxie666/Biomass-pyrolysis-data>

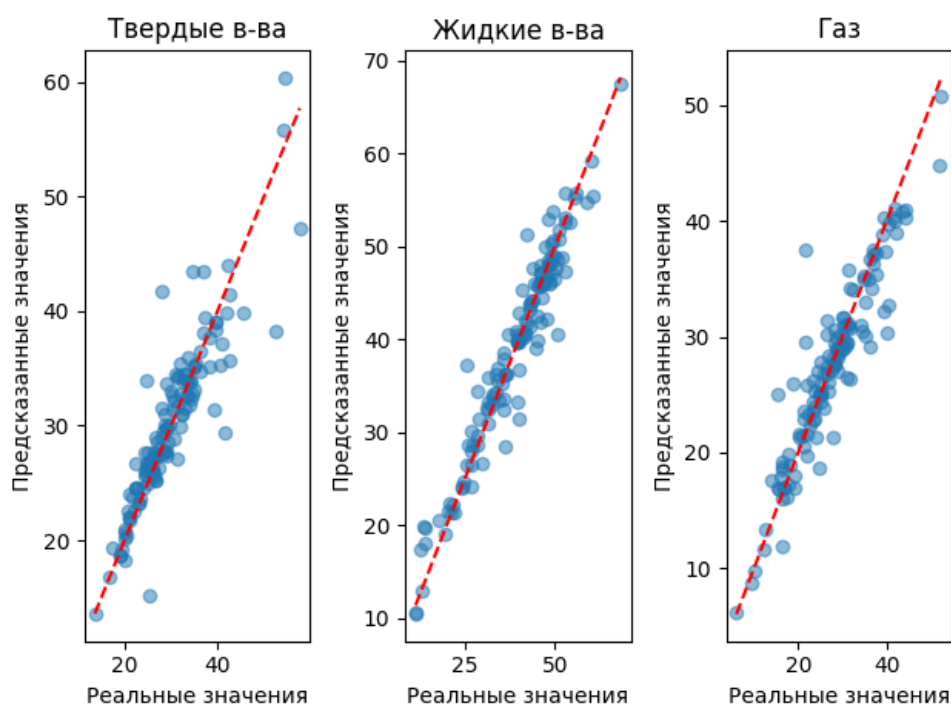


Рис. 1. График остатков предсказанных выходов конечных продуктов пиролиза

Был обучен ряд классических моделей машинного обучения (табл. 1).

Таблица 1

Метрики качества выбранных регрессионных моделей

	<i>Твердые вещества</i>		<i>Жидкие вещества</i>		<i>Газ</i>	
Модель	RMSE	R2	RMSE	R2	RMSE	R2
Random Forest Regression	3.3406	0.8124	2.8885	0.9376	3.1195	0.8694
Bagging Regressor	3.5456	0.7887	3.1001	0.9281	3.0602	0.8744
ExtraTrees Regressor	3.3850	0.8074	3.0055	0.9324	3.0192	0.8777
GradientBoosting Regressor	3.4373	0.8014	4.1398	0.8718	3.8490	0.8012
HistGradientBoosting Regressor	3.4741	0.7971	3.4189	0.9126	3.0953	0.8715

Также программный комплекс содержит в себе хранилище предобученных моделей и базу данных для хранения информации о параметрах натуральных экспериментов и характеристик сырья. Визуальный интерфейс разработан с помощью стандартной библиотеки языка Python для создания оконных приложений Tkinter¹.

По данным натуральных экспериментов программный комплекс позволяет визуализировать (см. рис. 2) ДСК кривые и подсчитывать энтальпию процесса.

¹ <https://docs.python.org/3/library/tkinter.html>

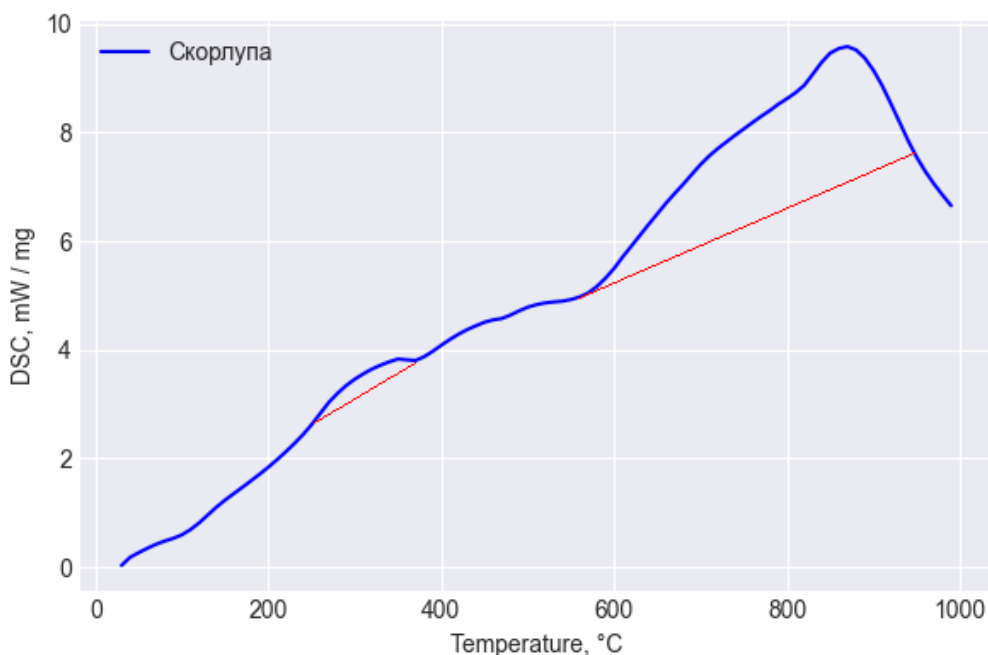


Рис. 2. Интерфейс построения ДСК кривой по данным натурального эксперимента

Заключение. Экспериментально-ориентированный подход значительно снижает зависимость от численных методов и, соответственно, снижает вычислительную сложность.

Применение методов машинного обучения для моделирования процесса пиролиза осложняется необходимостью формирования репрезентативной и достаточной по объему выборки, охватывающей вариативный спектр параметров процесса и характеристик сырья, для обеспечения адекватности и высокой предиктивной способности моделей.

Практическая значимость использования комплекса программ, реализующих предложенный подход, определяется возможностью оптимизации экспериментальных исследований, необходимых для разработки пиролизных установок и повышения их энергетической эффективности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Balsora, H.K., S, K., Joshi, J.B., Sharma, A., & Chakinala, A.G. 2023. Artificial Neural Network-Based Models for the Prediction of Biomass Pyrolysis Products from Preliminary Analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c01662>.
2. C. Tsekos, S. Tandurella, W. de Jong. 2021. Estimation of lignocellulosic biomass pyrolysis product yields using artificial neural networks, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. 157. 105180. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2021.105180>.
3. Eliseo Ranzi, Paulo Eduardo Amaral Debiagi, and Alessio Frassoldati. Mathematical Modeling of Fast Biomass Pyrolysis and Bio-Oil Formation. Note I: Kinetic Mechanism of Biomass Pyrolysis, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* 2017 5 (4), 2867-2881. DOI: 10.1021/acssuschemeng.6b03096.
4. Hyojin Lee, Il-Ho Choi, Kyung-Ran Hwang. 2024. Machine learning prediction of bio-oil production from the pyrolysis of lignocellulosic biomass: Recent advances and future perspectives // *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, Volume 179, 106486. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2024.106486>.

5. J. Shen & Yan, Mengguo & Fang, Minghong & Gao, Xi. 2022. Machine learning-based modeling approaches for estimating pyrolysis products of varied biomass and operating conditions // *Bioresource Technology Reports* 20. <http://doi.org/10.1016/j.biteb.2022.101285>.
6. Kaczor Z, Buliński Z, Werle S, Modelling approaches to waste biomass pyrolysis: A review, *Renewable Energy*, Volume 159, 2020, Pages 427-443, ISSN 0960-1481, DOI: 10.1016/j.renene.2020.05.110.
7. Xinzhe Zhu, Yinan Li, Xiaonan Wang. 2019. Machine learning prediction of biochar yield and carbon contents in biochar based on biomass characteristics and pyrolysis conditions. *Bioresource Technology*. Volume 288. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.121527>.
8. Астафьев А. В., Табакаев Р. Б., Языков Н. А., Загорин А. С. Теплофизическое обоснование пиролитической переработки возобновляемой биомассы за счет теплоты разложения // *Известия ТПУ*. 2020. №6. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/teplofizicheskoe-obosnovanie-piroliticheskoy-pererabotki-vozobnovlyayemoj-biomassy-za-schet-teploty-razlozheniya> (дата обращения: 11.03.2025).
9. Табакаев Р. Б., Алтынбаева Д. Б., Ибраева К. Т., Загорин А. С. Кинетические характеристики пиролиза биомассы // *Известия ТПУ*. 2020. №12. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/kineticheskie-harakteristiki-piroliza-biomassy> (дата обращения: 10.04.2025).