

На правах рукописи



Баденко Владислав Вадимович

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ИНСТРУМЕНТОВ ДЛЯ
КИНЕТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА И МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ БИОМАССЫ В
ГИБРИДНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Иркутск – 2026

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИСЭМ СО РАН)

Научный руководитель: кандидат технических наук
Козлов Александр Николаевич

Официальные оппоненты: **Лукияненко Дмитрий Витальевич**,
доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», кафедра математики отделения прикладной математики физического факультета, профессор

Башарина Ольга Юрьевна,
кандидат технических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уральский государственный экономический университет», кафедра бизнес-информатики, доцент

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург

Защита диссертации состоится «30» июня 2026 года в 9 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета 24.1.118.01, созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИСЭМ СО РАН) по адресу: 664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, к. 355.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИСЭМ СО РАН по адресу: 664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, к. 407 и на сайте ИСЭМ СО РАН: <https://isem.irk.ru/dissert2/case/DIS-2026-4/>

Отзывы на автореферат в двух экземплярах с подписью составителя, заверенные печатью организации, просим направлять по адресу: 664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, к. 355 на имя ученого секретаря диссертационного совета 24.1.118.01.

Автореферат разослан «__» апреля 2026 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.118.01,
доктор технических наук, доцент



Солодуша Светлана Витальевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. Общемировая тенденция по использованию возобновляемых источников энергии в рамках четвертого энергоперехода повышает актуальность исследований в этой области. В Российской Федерации одним из приоритетных направлений научно-технического развития является развитие ресурсосберегающей энергетики. В эту область входят технологии энергетического использования углеродсодержащих материалов, в том числе биомассы. Использование биомассы в энергетике является важным направлением в контексте перехода к возобновляемым источникам энергии и снижения углеродного следа. В условиях глобального энергетического кризиса и ужесточения экологических норм технологии термохимической конверсии биомассы (пиролиз, газификация, прямое сжигание) приобретают особую значимость. Данный факт обусловлен несколькими причинами:

1. Экологическая значимость – биомасса является углеродно-нейтральным ресурсом, а ее использование способствует сокращению выбросов парниковых газов по сравнению с ископаемыми топливами.
2. Энергетическая эффективность – современные технологии позволяют получать из биомассы не только тепловую энергию, но и ценные химические продукты (синтез-газ, биоуголь, жидкие топлива).
3. Экономическая целесообразность – переработка отходов лесной и сельскохозяйственной промышленности в энергоносители снижает затраты на утилизацию и повышает рентабельность предприятий.
4. Необходимость оптимизации процессов – существующие установки термохимической конверсии требуют совершенствования для повышения эффективности, что невозможно без углубленного изучения кинетики процессов и разработки точных математических моделей.

Несмотря на существующий потенциал, технологии термохимической конверсии биомассы пока не получили широкого промышленного внедрения, и еще не могут напрямую конкурировать с уже устоявшимися технологиями на основе невозобновляемых источников энергии. Для повышения эффективности таких технологий требуются более детальные экспериментальные и теоретические исследования, а также вычислительные инструменты моделирования.

Степень разработанности темы исследования. Математическое моделирование пиролиза древесных отходов и разработка систем мониторинга гибридных микроэнергосистем являются активно развивающимися направлениями в энергетике и переработке биомассы. В последние годы эти темы привлекают внимание как российских, так и зарубежных исследователей.

Термохимическая конверсия древесных отходов изучается с точки зрения кинетики реакций, тепло- и массопереноса, а также оптимизации параметров процесса. Среди российских ученых можно отметить: Рыжкова А.Ф., разрабатывающего вопросы предварительной обработки топлива и его газификации с учетом региональной специфики; Кейко А.В., разрабатывающего теорию газификации топлив сложного состава; Кузнецова Г.В., исследующего поведение жидкой фазы в процессах термохимической конверсии; Мунца В.А., разрабатывающего расчетные модели различных реакторов конверсии биомассы; Стрижака П.А., исследующего пиролиз композиционной биомассы.

Среди зарубежных ученых, внесших значительный вклад в эту область, можно выделить: Бриджватера А.В., исследовавшего термохимические процессы конверсии биомассы; Ди Блази С., разработавшего детальные кинетические модели пиролиза; Вязовкина С., создавшего оригинальный метод итерационного расчета кинетических параметров; Левеншпиля О., предложившего методы моделирования химических реакторов, применимые к пиролизу и др.

Гибридные микроэнергосистемы, включающие возобновляемые источники энергии (ВИЭ), требуют интеллектуальных систем управления и мониторинга. Зарубежные исследования в этой области представлены работами: Ашок С., предложившего модель поиска оптимального компонентного состава гибридных микросистем; Нема П., исследующего гибридные сети, совмещающие возобновляемые источники энергии и резервные дизельные генераторы; Афган Н., разработавшего метод оценки устойчивости гибридной энергетической системы.

Существенный вклад в систематические исследования гибридных энергосистем внесли отечественные ученые: Воропай Н.И.; Клер А.М.; Гамм А.З; Сидоров Д.Н.; Велькин В.И.; Щеклеин С.Е.; Суслов К.В.; Тягунов М.Г.; Тарасенко А.Б.; Филиппов С.П. и др.

Несмотря на значительное количество исследований, остается ряд нерешенных вопросов в области кинетики термохимических процессов: существующие методы кинетического анализа позволяют оценить общую энергию активации, но не учитывают индивидуальные реакции образования конкретных газообразных продуктов; недостаточно изучено влияние размера частиц биомассы, скорости нагрева и состава газовой среды на кинетические параметры. В области математического моделирования реакторов конверсии существует проблема слабо охарактеризованной связи данных термогравиметрии и масс-спектрометрии с параметрами моделирования. Также, большинство CFD-моделей основаны на упрощенных кинетических схемах, что снижает их точность. В области использования программного обеспечения при исследовании термохимической конверсии отсутствуют решения для узкоспециализированных задач.

Целью диссертационного исследования является: разработка численного метода для кинетического анализа и построение математической модели установки термохимической конверсии низкосортных твердых топлив на основе пакета вычислительной гидродинамики; интеграция разработанных модели и численного метода в комплексы программ, связанные с установками генерации энергии из возобновляемых источников.

В соответствии с целью работы были поставлены задачи:

1. Осуществить модификацию численного метода Коутса-Редферна для решения обратной кинетической задачи в условиях термохимической конверсии твердых топлив по результатам инструментальных исследований (термический анализ и масс-спектрометрия).
2. Сформировать математическую модель реактора термохимической конверсии биомассы; интегрировать в модель, основанную на уравнениях Навье-Стокса и модели турбулентности Ментера, механизм реакций образования газообразных веществ и кинетическую модель с использованием данных, полученных с помощью модификации метода Коутса-Редферна.
3. Осуществить экспериментальное исследование работы электрогенератора в составе гибридной микросети на различном топливе и получить данные об эффективности работы на синтез-газе.
4. Разработать программное обеспечение для проведения аналитических исследований на основе данных о функционировании гибридной микросети лабораторного масштаба, использующей возобновляемые источники энергии, в том числе газогенераторную электростанцию на древесных отходах.
5. Разработать реализацию математической модели реактора термохимической конверсии биомассы на основе пакета вычислительной гидродинамики, провести вычислительный эксперимент и верифицировать модель. Разработать программные решения для автоматизированной обработки и визуализации результатов инструментальных исследований по теме диссертационной работы.

Объектом диссертационного исследования является гибридная энергосистема, включающая в себя реактор термохимической конверсии биомассы.

Предметом диссертационного исследования является разработка и экспериментальная апробация методов и вычислительных инструментов для кинетического анализа и математического моделирования термохимической конверсии биомассы в гибридных энергетических системах.

Научная новизна диссертационной работы заключается в комплексном подходе, объединяющем усовершенствованные методы кинетического анализа, моделирование на основе уравнений вычислительной гидродинамики и разработку программных решений, направленном на повышение эффективности энергетических систем на основе возобновляемых ресурсов. Для этого разработаны новые и усовершенствованы имеющиеся подходы к проведению

численных экспериментов, а также предложены программно-вычислительные комплексы:

Модифицированный вычислительный метод Коутса-Редферна для расчета кинетических коэффициентов термохимической конверсии биомассы. Модификация метода заключается в замене подынтегральной функции степени конверсии в исходном уравнении на промежуточную подынтегральную функцию и использовании расширенного набора входных данных (термического анализа и масс-спектрометрии): эффективную массу образца, скорость нагрева, расход транспортного газа, масс-спектры транспортного газа и образующихся газовых компонентов. Такая модификация исходного численного метода позволила учесть нелинейные эффекты и рассчитать кинетику образования каждого газообразного продукта реакции. Метод направлен на решение обратной кинетической задачи в условиях изменения температуры и протекания комплексных реакций конверсии.

Комплексная математическая модель реактора пиролиза учитывает термохимические процессы, гидродинамику, тепломассоперенос, и позволяет проводить численные эксперименты, необходимые для оптимизации режимов работы реакторов и масштабирования их мощностного ряда. Модель позволяет использовать новые данные о термохимической конверсии биомассы, полученные модифицированным методом Коутса-Редферна.

Проведенное экспериментальное исследование работы электрогенератора в составе гибридной микросети лабораторного масштаба позволило получить данные об эффективности данного узла и энергосистемы в целом, необходимые для дальнейшей оптимизации системы.

Разработанное программное обеспечение, направленное на исследование работы гибридной микросети и проведение кинетического анализа используемых топлив позволяет расширить возможности для проведения аналитических исследований.

Модифицированный метод был реализован в виде специализированного программно-вычислительного комплекса, который обеспечивает автоматизированную обработку экспериментальных данных, визуализацию результатов и экспорт данных для дальнейшего моделирования.

Теоретическая значимость работы. Разработанная модификация численного метода Коутса-Редферна позволила повысить точность расчета кинетических параметров за счет учета нелинейных эффектов и корреляции с данными термического анализа и масс-спектрометрии. Данный результат открывает новые возможности для моделирования сложных многостадийных процессов конверсии биомассы. В разработанную математическую модель реактора термохимической конверсии интегрированы кинетические параметры, полученные модифицированным методом, что способствует развитию методов многомасштабного моделирования термохимических процессов.

Практическая значимость работы. Проведенные экспериментальные исследования, сопряженные с фундаментальными исследованиями (модификация численного метода), прикладным программированием и инженерными разработками (моделирование, мониторинг энергосистем), способствуют развитию возобновляемой энергетики, оптимизации термохимических процессов и внедрению цифровых технологий в энергетику. Разработанные программные комплексы обеспечивают воспроизводимость расчетов и дальнейшее развитие метода определения кинетических параметров.

Методология и методы исследования. В работе использовано сочетание различных методов исследования: инструментальные, численные, экспериментальные. Инструментальные исследования для получения кинетических параметров проводились с применением комплекса синхронного термического анализа STA449 F1 производства компании Netzsch, Германия; а также макротермогравиметрического анализатора TGA 801 LECO, США. Разработанные математические модели основаны на уравнениях вычислительной гидродинамики и гетерогенной кинетики, которые реализуются в программном пакете Ansys CFX. Экспериментальные исследования проводились с использованием лабораторной установки пиролиза и гибридной энергосистемы с возобновляемыми источниками энергии. Программные комплексы реализованы на языке программирования Python, система мониторинга реализована на языке программирования JavaScript и языке разметки HTML.

Положения, выносимые на защиту.

1. Модификация численного метода Коутса-Редферна, заключающаяся в использовании расширенного набора входных данных (термического анализа и масс-спектрометрии) и замене подынтегральной функции степени конверсии в исходном уравнении, позволяющая получить новые данные о кинетике термохимической конверсии.
2. Математическая модель реактора пиролиза древесной биомассы, использующая новые данные, полученные модифицированным методом Коутса-Редферна, позволяющая получить более точную оценку параметров конверсии.
3. Экспериментальное исследование работы электрогенератора в составе гибридной микросети на синтез-газе и модельной смеси, необходимое для анализа работы данного узла и энергосистемы в целом.
4. Система мониторинга работы гибридной микросети в виде программно-вычислительного комплекса, направленная на аналитическое исследование работы энергосистемы.
5. Реализация математической модели реактора пиролиза древесной биомассы с использованием пакета вычислительной гидродинамики (CFD) Ansys. Реализация модифицированного метода в виде прикладного программно-

вычислительного комплекса, предназначенного для получения данных о кинетических параметрах и визуализирующего результаты расчетов.

Соответствие диссертации паспорту специальности. Содержание диссертационной работы соответствует паспорту научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки) по следующим пунктам:

П.3. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента (положения 1, 5, выносимые на защиту).

П.4. Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели (положения 1, 2, выносимые на защиту).

П.9. Постановка и проведение численных экспериментов, статистический анализ их результатов, в том числе с применением современных компьютерных технологий (технические науки) (положения 3, 4, 5, выносимые на защиту).

В диссертации присутствуют оригинальные результаты из трёх областей:

1. Математическое моделирование. Динамическая модель процессов, протекающих в реакторе пиролиза биомассы, на основе дифференциальных уравнений вычислительной гидродинамики.
2. Численные методы. Новый оригинальный вычислительный метод расчета кинетических параметров по данным совмещенного термического и масс-спектрометрического исследования, являющийся модификацией метода Коутса-Редферна.
3. Комплексы программ. Проблемно-ориентированная программная реализация предложенного подхода к обработке данных эксперимента. Внедрение системы мониторинга работы экспериментальной установки.

Достоверность результатов работы. Достоверность результатов обеспечивается применением современного высокоточного оборудования для исследования термохимической конверсии топлив, воспроизводимостью результатов измерений и расчетов, сопоставлением полученных результатов с известными литературными данными, применением стандартизированных и известных методов кинетического анализа, уравнений вычислительной гидродинамики.

Апробация работы. Результаты диссертационного исследования докладывались и обсуждались на 5 мероприятиях международного уровня и на 8 мероприятиях всероссийского уровня. Результаты были отмечены призовыми местами на конференциях и конкурсах научно-исследовательских работ, повышенной и именной стипендиями ИСЭМ СО РАН (2023,2024), стипендией Губернатора Иркутской области (2024), стипендией Президента Российской

Федерации (2025). Результаты работы использовались в рамках 9 проектов, в том числе международных.

Публикации по теме диссертационной работы. По теме диссертационной работы опубликовано 16 статей, в том числе 4 – в рецензируемых научных изданиях журналах, рекомендованных ВАК РФ по специальности 1.2.2 (К2), 3 – в рецензируемых изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science (Q1 и Q2), 9 – в иных изданиях. Получено одно авторское свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы из 179 наименований, 4 приложений. Общий объем работы составляет 150 страниц, включает 46 рисунков и 9 таблиц.

Личный вклад автора. При осуществлении диссертационного исследования автором лично выполнены следующие работы: проведен термический анализ образцов биомассы на комплексе термического анализа; проведен кинетический анализ термохимической конверсии биомассы; разработан и зарегистрирован вычислительный метод, использующий данные масс-спектрометрии, полученные методом термического анализа; создана программная реализация вычислительного метода; выполнено формирование данных для математического моделирования реактора конверсии; создана математическая модель реактора конверсии на базе пакета Ansys; произведено сопоставление результатов численного моделирования с экспериментальными данными; разработана и внедрена система мониторинга лабораторной микросети на языках JavaScript и HTML.

Часть работы выполнена автором совместно с коллегами: экспериментальные исследования работы гибридной микросети выполнены при поддержке к.т.н. А.Н. Козлова, к.х.н. М.В. Пензика, инж. М.С. Кацуба; аспиранта Сосновского И.К.; в обсуждении результатов работы приняли участие к.т.н. А.Н. Козлов, к.х.н. М.В. Пензик.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертации приведены: актуальность темы исследования; степень ее проработанности; цели и задачи; научная новизна; теоретическая и практическая значимость работы; методология и методы исследования; положения, выносимые на защиту; степень достоверности и апробации результатов, а также другие сведения.

В первой главе подробно поставлены задачи исследования и возникающие в ходе их решения подзадачи, рассмотрены применяемые аналитические, расчетные и инструментальные методы и подходы, приведены примеры исследований по тематике термохимической конверсии.

В рамках диссертационной работы рассматривается энергосистема, основанная на возобновляемых источниках энергии и реализованная в

лабораторном масштабе. Основными узлами энергосистемы являются фотоэлектрические преобразователи и газогенератор. Для согласования и повышения эффективности энергосистемы в целом требуются инструменты для сбора и анализа данных о различных характеристиках каждого ее элемента. В диссертационной работе предложена система мониторинга, предназначенная для решения этих задач, реализованная в виде проблемно-ориентированного программного комплекса. В рамках данной главы приведено описание применения различных узкоспециализированных программных комплексов, связанных с задачами, возникающими в ходе исследования термохимической конверсии биомассы и работы гибридных микросетей.

В рассматриваемой системе газогенератор напрямую связан с генератором электроэнергии, адаптированным под использование в качестве топлива синтез-газа. Эффективность работы электрогенератора напрямую зависит от процессов, протекающих внутри газогенератора и от характеристик биомассы, выступающей в качестве топлива для газогенератора. Для повышения стабильности и эффективности работы этой части энергосистемы необходимо применение не только экспериментальных и инструментальных исследований, но и применение математического моделирования, вычислительных экспериментов, а также кинетического анализа. В диссертационной работе предложена математическая модель реактора пиролиза, основанная на экспериментальных данных, уравнениях вычислительной гидродинамики и данных кинетического анализа исходного сырья, реализованная в программной среде Ansys. Моделирование процесса пиролиза связано с тем, что пиролиз является основным процессом термохимической конверсии и определяет основные режимные характеристики (температура, давление), а также состав продуктов конверсии, в том числе синтез-газа. В процессе выхода летучих компонентов доступ окислителя к частицам топлива ограничен, поэтому до окончания этого процесса происходит именно пиролиз. Таким образом могут быть получены данные для более сложных моделей. В рамках данной главы приведены основные уравнения, используемые при математическом моделировании термохимической конверсии биомассы, описаны принципы работы пакетов вычислительной гидродинамики, представлено описание принципов работы наиболее распространенного метода численного решения уравнений, используемых в моделировании. Также приведено описание наиболее распространенных коммерческих и бесплатных программных пакетов моделирования вычислительной гидродинамики.

Биомасса, используемая в качестве энергетического сырья, имеет существенно различающиеся свойства, в зависимости от происхождения и состава. Варьироваться может содержание влаги, теплотворная способность, состав газовых продуктов, зольность, доля нереагирующего остатка и другие параметры. В связи с этим, большое значение имеют инструментальные исследования, целью применения которых являются данные о свойствах

конкретного образца биомассы при изменении температуры и в присутствии (или отсутствии) окислителя. Применение синхронного термогравиметрического анализа, совмещенного с масс-спектрометрией (ТГА-МС), является эффективным решением для этой задачи. Полученные таким способом данные также можно использовать для получения кинетических коэффициентов. В диссертационной работе использовались инструментальные исследования на комплексе синхронного термического анализа для получения таких данных.

Существуют различные методы кинетического анализа, предназначенные для получения энергии активации и предэкспоненциального множителя на основе термогравиметрических зависимостей, получаемых применением синхронного термического анализа. Классические методы направлены на описание обобщенной реакции конверсии образца целиком. В диссертационной работе предложен оригинальный вычислительный метод кинетического анализа, предполагающий использование не только термогравиметрической зависимости, но и данных масс-спектрометрии для получения кинетических коэффициентов. Метод является модификацией метода Коутса-Редферна, направленной на описание кинетики выделения конкретного газообразного соединения. В рамках данной главы приводится анализ предметной области энергетического использования биомассы, описываются подвиды термохимической конверсии и их целевые продукты. Представлен обзор применения комплексов термического анализа для описания свойств конкретного энергетического сырья для дальнейшего использования этих данных при оптимизации режимов работы. Описаны распространенные методы кинетического анализа данных термогравиметрии и их ключевые особенности.

Алгоритм проведения диссертационного исследования представлен на Рисунке 1, на котором отражена идея иерархической структуры исследования, заключающаяся в расширении области исследования от кинетики реакций при термохимической конверсии биомассы до исследования работы гибридной энергосистемы в целом.

Исследуемая на первом этапе проблема кинетики была решена путем внедрения оригинального модифицированного метода кинетического анализа, использующая корреляцию с данными термического анализа и масс-спектрометрии. Затем решалась практическая задача по внедрению проблемно-ориентированных программных комплексов, позволяющих автоматизировать процесс применения предложенного оригинального метода кинетического анализа. На следующем этапе был рассмотрен реактор термохимической конверсии, в котором необходимо учитывать не только кинетику реакций конверсии, но и гидродинамику, температурные и режимные характеристики, влияние исходного сырья. Была разработана CFD-модель реактора пиролиза и осуществлена верификация модели, а также проведена интеграция кинетических параметров, полученных на прошлом этапе. На последнем этапе рассматривались проблемы, связанные с работой гибридной энергосистемы и

предложено проблемно-ориентированное программное решение в виде системы мониторинга различных параметров.

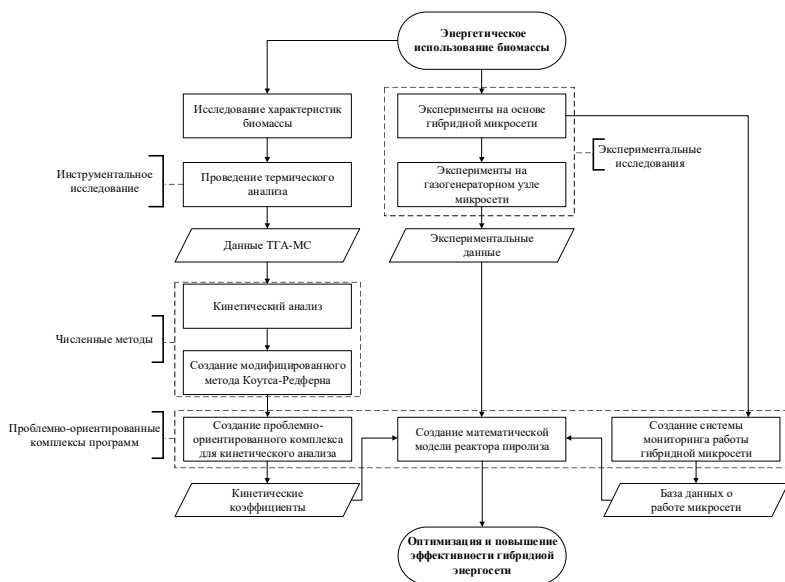


Рисунок 1 – Алгоритм, отражающий этапы диссертационной работы

Таким образом, для повышения эффективности узлов энергосистемы используются: система мониторинга работы энергосистемы в целом, математическое моделирование одного из ее узлов – реактора конверсии, кинетический и инструментальный анализ исходного сырья. В ходе кинетического анализа предложен оригинальный модифицированный метод, направленный на получение детальной информации о кинетике образования газовых, жидких и твердых продуктов термохимической конверсии биомассы.

Приведенные разработки отражают применение численных методов, комплексов программ и математического моделирования при решении задач энергетического использования возобновляемых источников энергии.

Во второй главе рассматривается решение обратной задачи кинетики путем применения оригинальной модификации метода Коутса-Редферна. Рассматриваемая обратная задача кинетики характеризуется нелинейностью, некорректностью и граничными условиями, определяемыми параметрами эксперимента. Задачу можно представить в виде:

$$k(A, E_a, n) = G_j(\alpha(T_i)), \quad (1)$$

где константа скорости k зависит от полученных кинетическими коэффициентами и порядка выбранной модельной реакции n , а G_j – оператор, преобразующий

функцию степени конверсии α в вид, пригодный для получения кинетических коэффициентов. Индекс i в (1) указывает на дискретность данных о температуре и степени конверсии, а индекс j указывает на избранный при решении метод кинетического анализа.

Решение задачи путем применения классических методов предполагает использование в качестве входных данных массив термогравиметрических данных, получаемый с помощью одного или нескольких (с варьированием скорости нагрева) инструментальных исследований на комплексах термического анализа и применение соответствующих уравнений и аппроксимаций. Наибольшее распространение получили численные методы Фридмана, Киссинджера, Озавы-Флинна-Уолла, Коутса-Редферна. Последний чувствителен к стадиям процесса, что является преимуществом, однако, предполагает большую сложность применения. В классическом методе Коутса-Редферна на основе данных термогравиметрии строится зависимость $\ln(-\ln(1-\alpha)/T^2)$ от обратной температуры, которая может быть аппроксимирована линейной функцией. Затем, путем графического построения или с помощью регрессионного анализа вычисляется коэффициент наклона данной функции, равный $-E_a/R$, а ордината пересечения с осью, соответствующая нулю обратной температуры пропорциональна $\ln A$.

Основное отличие и преимущество предлагаемой модификации численного метода Коутса-Редферна заключается в использовании данных ТГА-МС, которые не использовались в качестве входных данных в используемых методах кинетического анализа. Новый вычислительный метод позволяет более детально рассматривать реакции, протекающие при конверсии, так как позволяет рассмотреть кинетические параметры выделения конкретного газообразного вещества. Внедрение нового типа данных осуществляется через промежуточную функцию, связывающую данные масс-спектрометрии и параметры инструментального исследования, проведенного с помощью комплекса термического анализа:

$$F = \frac{V_{tr}}{m_{eff} \cdot \beta} \int_{T_0}^{T_{end}} \frac{I}{I_{tr}} dT, \quad (2)$$

где описание переменных указано в алгоритме применения модифицированного метода Коутса-Редферна для первого порядка реакции, который сводится к следующим шагам:

1. Проведение инструментального исследования на комплексе термического анализа с различной скоростью нагрева.
2. Получение входных данных - данные масс-спектрометрии $I(T)$, $I_{tr}(T)$ и характеристики эксперимента: температура $T(K)$, расход транспортного газа V_{tr} (мл/мин), скорость нагрева β (К/мин), масса образца m (мг), остаточная масса образца m_{res} (мг), масса влаги m_{moi} (мг).
3. Вычисление эффективной массы $m_{eff} = m - m_{res} - m_{moi}$.

4. Расчет промежуточной функции $F(T) = \frac{V_{tr}}{m_{eff} \cdot \beta} \int_{T_0}^{T_{end}} \frac{1}{I_{tr}} dT$ методом трапеций.
5. На основании уравнения $\ln \left[\frac{|\ln F(T)|}{T^2} \right] = \ln \left[\frac{AR}{\beta E_a} \right] - \frac{E_a}{RT}$ построение функции $\ln \left[\frac{|\ln F(T)|}{T^2} \right]$ от обратной температуры. Вычисление коэффициентов k и b линейной аппроксимации, проведенной через экстремумы графически или применением формул линейной регрессии.
6. Расчет кинетических коэффициентов $E_a = -kR, A = \frac{\beta E_a e^b}{R}$.

Из (2) возникает необходимость вычисления определенного интеграла на основе экспериментальных данных. Кривые ионного тока и их соотношение не могут быть описаны аналитически без потери точности, поэтому необходим метод приближенного вычисления определенного интеграла для дискретных данных, не поддающихся формализации полиномами. В данном случае среди методов Ньютона-Котеса наиболее предпочтительным является метод трапеций.

Массив данных $F(T)$, содержащий записанные значения для каждого шага численного интегрирования и имеющий размерность м³/г или л/г, может быть интерпретирован как описательная функция конверсии, содержащая экстремумы выделения вещества в ходе реакции. Вовлечение входных данных, отличающихся от других методов, а также учет их особенностей, указывают на отличие модифицированного метода от модификации уравнения. Итоговый результат интегрирования может быть использован в качестве оценочной количественной характеристики, отражающей процесс выделения газообразных веществ в ходе конверсии

Было проведено исследование для демонстрации применения модифицированного численного метода. В качестве материала для исследования использовали отходы лесозаготовок древесины, в частности сосны (*Pinus sylvestris*). Древесные отходы измельчали путем поперечного пиления, а затем с помощью ситового анализа были отобраны для дальнейшего исследования три фракции 0,1 мм; 0,315 мм и 2–3 мм. Древесные опилки исследовали с использованием синхронного термического анализатора STA 449 F1 Jupiter (NETZSCH, Германия). Анализ выходящих газов проводили с использованием квадрупольного масс-спектрометра QMS 403 C Aeolos (NETZSCH, Германия), который соединен с термическим анализатором посредством кварцевого капилляра.

Результаты построения аппроксимирующих функций для образца биомассы крупности 0,1 мм приведены на Рисунке 2. На основании полученных данных ТГА-МС были рассчитаны кинетические коэффициенты и параметры количественной оценки выделения газообразных продуктов термохимической конверсии. Результаты расчетов кинетических коэффициентов представлены в Таблице 1. Результаты расчетов количественной оценки приведены в Таблице 2.

Таблица 1 – Кинетические параметры для различных массовых чисел по данным ТГА-МС для образца крупностью 0,1 мм

m/z	E _a , кДж/моль		A, 1/с	
	Первая стадия	Вторая стадия	Первая стадия	Вторая стадия
H ₂	6,6	12,0	1,07E-01	4,77E-02
CH ₄	8,0	11,7	5,57E-02	3,78E-02
H ₂ O	19,5	33,1	9,48E-01	1,18E+00
NO	10,0	12,7	4,87E-01	4,63E-01
CO ₂	22,9	70,2	2,76E-04	1,06E-08

Таблица 2 – Количественная оценка выделения для различных массовых чисел по данным ТГА-МС для образца крупностью 0,1 мм

β, К/мин	5	15	30	50
F _{H2} , л/г	0,005	0,01	0,003	0,004
F _{CH4} , л/г	0,035	0,029	0,016	0,038
F _{H2O} , л/г	2,028	1,92	0,967	1,424
F _{NO} , л/г	0,072	0,05	0,041	0,072
F _{CO2} , л/г	2,815	3,515	2,509	3,618

Модифицированный вычислительный метод Коутса-Редферна был реализован в виде программного комплекса на языке Python. Входными данными являются данные масс-спектрометрического исследования и параметры эксперимента. Результатом работы программно-вычислительного комплекса является создание таблицы, содержащей точки экстремумов, линейная аппроксимация которых дает возможность вычисления кинетических коэффициентов. Программный комплекс представляет собой компьютерную модель кинетики выделения газообразных компонентов при конверсии. На Рисунке 3 показан алгоритм работы реализации модифицированного метода Коутса-Редферна, а отношение массы к заряду обозначено как m/z.

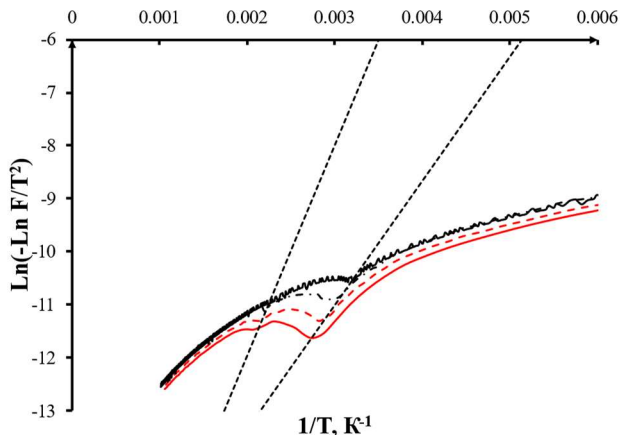


Рисунок 2 – Построение линейных аппроксимаций для образца биомассы. Красная сплошная линия соответствует скорости нагрева 50 К/мин, красная пунктирная – 30 К/мин, черная пунктирная – 15 К/мин, черная сплошная – 5 К/мин



Рисунок 3 – Блок-схема, отражающая алгоритм работы программно-вычислительного комплекса

Таким образом, во второй главе приведено описание классического метода Коутса-Редферна и его оригинальной модификации, направленной на получение кинетических коэффициентов для реакций образования конкретного газообразного соединения. Также приведено описание программного комплекса, обеспечивающего автоматизированную обработку данных ТГА-МС исследования и применение модифицированного метода Коутса-Редферна к этим данным.

В третьей главе рассматривается задача моделирования реактора термохимической конверсии. Граничные условия определяются параметрами моделируемого реактора конверсии. Основным результатом моделирования являются данные о составе синтез-газа, являющегося продуктом термохимической конверсии. Решение этой задачи может быть осуществлено применением пакетов вычислительной гидродинамики в следующей последовательности: 1. Задание начальных условий, физико-химических параметров и подмоделей вычислительной гидродинамики, кинетики, теплопередачи и др.; 2. Создание геометрической модели объекта; 3. Разбиение геометрической модели (создание расчетной сетки); 4. Выполнение непосредственного решения методом конечных объемов и исследование сеточной независимости; 5. Визуализация и интерпретация результатов расчета. Разработана новая математическая модель слоевого реактора пиролиза биомассы, в которой наряду с известными уравнениями гидродинамики и тепломассообмена использованы данные о скоростях химических реакций, полученные с помощью модифицированного метода Коутса-Редферна.

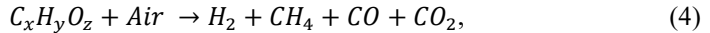
В основе математической модели лежат основные уравнения вычислительной гидродинамики - уравнения неразрывности и уравнения Навье-Стокса. Слой биомассы рассматривался в виде пористой среды, сквозь которую проходят газообразные продукты. Использовался подход Рейнольдса-Навье-Стокса, а именно модель турбулентности Менгера (SST). Модель турбулентности переноса напряжения сдвига Менгера (SST) для газовой среды описывалась как:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} = P - \beta \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right],$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \omega)}{\partial x_j} = \frac{\gamma}{\nu_t} P - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F) \frac{\partial \rho \sigma}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \quad (3)$$

где γ, β, β' – корректировочные константы модели, P и F – функции генерации возмущения ($\text{м}^2/\text{с}^3$) и диссипации, u_i – турбулентная вязкость ($\text{Па}\cdot\text{с}$), ω – удельная скорость диссипации (с^{-1}), σ_ω – турбулентное число Прандтля для удельной скорости диссипации. Модель SST была выбрана из-за того, что в ней используются модели $k-\omega$ и $k-\varepsilon$ в зависимости от заданных условий. Модель Ментера адаптивно применяет соответствующее свободному потоку или пограничному слою уравнение. Для описания сопротивления слоя использовалась подмодель Gidaspow.

Для описания протекающих в реакторе процессов предложена обобщенная кинетическая реакция, пренебрегающая выделением смолы, сажи и выделяющая только основные компоненты синтез-газа в качестве приближения:



где Air – имеющийся в реакторе на момент эксперимента воздух, описываемый как смесь азота и кислорода, k_i – константа скорости реакции. Для каждого продукта задаются кинетические коэффициенты – энергия активации и предэкспоненциальный множитель, полученные путем применения модифицированного метода кинетического анализа. Эти коэффициенты необходимы для расчета константы скорости реакции, которая используется при моделировании.

В качестве выходных данных модели рассматривались массовые доли Y газовых компонентов, рассчитываемые в соответствии системой уравнений (5), так как состав получаемого в ходе конверсии синтез-газа имеет большое значение для работы гибридной микросети в целом:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N \vartheta_{i,r} M_i \xrightarrow{k_{f,r}} \sum_{i=1}^N \vartheta_{i,r} M_i', \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i, \\ \vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{i,T} \frac{\nabla T}{T}, \\ R_{i,r} = \vartheta_{i,r} M_i C_1 C_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p Y_p}{\sum_j \vartheta_{j,r} M_j}, \end{cases} \quad (5)$$

где M – молярная масса реагента (M' – продукта) ($\text{кг}/\text{моль}$), ϑ – стехиометрический коэффициент (ϑ' – продукта), k_c – константа скорости реакции (с^{-1} для первого порядка реакции), Y – массовая доля, ρ – плотность ($\text{кг}/\text{м}^3$), J – диффузионный поток для компонента j в смеси газов ($\text{кг}/\text{м}^2\cdot\text{с}$), $D_{i,m}$ – коэффициент молекулярной диффузии ($\text{м}^2/\text{с}$), $D_{i,T}$ – коэффициент тепловой диффузии ($\text{кг}/\text{м}\cdot\text{с}$), C_1 и C_2 – константы выбранной турбулентной модели, μ – турбулентная вязкость ($\text{Па}\cdot\text{с}$), Sc – число Шмидта (обычно принимается равным 0,7), R_i – молярная скорость образования ($\text{кг}/\text{м}^3\cdot\text{с}$), ε – скорость диссипации, определяющая перемешивание ($\text{м}^2/\text{с}^3$), k – турбулентная кинетическая энергия на единицу массы ($\text{м}^2/\text{с}^2$).

Для газовой среды, состоящей из смеси газов, использовалось уравнение теплопроводности, включающее влияние давления, тепла от химических реакций и внешних источников, перенос энергии через диффузию и вязкую диссипацию:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\tau_{i,j} \cdot \vec{v})) + S_h, \quad (6)$$

где $k_{eff} = k + k_t$ – эффективная теплопроводность, определяемая как сумма заданной теплопроводности и турбулентной (Вт/м·К); k_t – турбулентная теплопроводность, определяемая в зависимости от используемой модели турбулентности; J – диффузионный поток для компонента j в смеси газов (кг/м²·с); v – скорость (м/с); S_h – тепло от химических реакций и внешних источников (Вт/м³); p – давление (Па); $\tau_{i,j}$ – тензор напряжений (Па); ρ – плотность (кг/м³); E – полная удельная энергия (Дж/кг); h – удельная энтальпия (Дж/кг). Для описания теплопередачи к стенкам реактора использовалось уравнение Пуассона для гомогенной и изотропной среды.

Расчет производился методом конечных объемов. Принципиальная схема моделируемого объекта и расчетная сетка в разрезе показаны на Рисунке 4. Расположение точек для сбора расчетных данных выбрано аналогично положению аналитических термопар в экспериментальной установке. Математическая модель была применена к объекту моделирования, таким образом была получена компьютерная модель. На основе разработанных компьютерной и математических моделей было осуществлено решение методом конечных объемов в программном пакете Ansys Fluent. В результате проведения вычислительного эксперимента на разработанной модели были рассчитаны нормализованные концентрации горючих компонентов синтез-газа (Рисунок 5). Верификация модели проведена на основе экспериментальных данных с применением статистической оценки. Расчетные данные были сопоставлены с экспериментальными и литературными результатами, путем расчета коэффициента достоверности аппроксимации (расчетные данные рассматривались как аппроксимирующие) и применением критерия Фишера. В основу модели были положены данные о пиролизе биомассы при температуре 480°C. Однако, в связи с этим, сходимость расчетных данных при других температурных программах значительно ниже и требует дальнейших доработок: учет времени начала образования компонента, внесение поправок на нелинейность процессов выделения газовых компонент, уточнения температурных программ в математической модели. Коэффициенты детерминации расчетных кривых лежат в диапазоне $0,85 < R^2 < 0,9$. Такая точность удовлетворительна при использовании модели для оценочного прогнозирования.

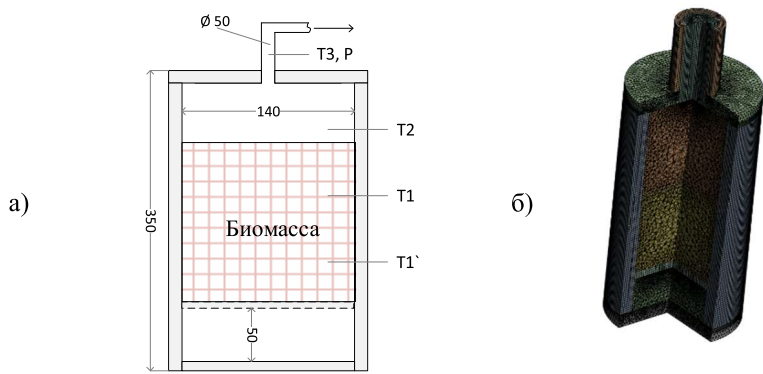


Рисунок 4 – Принципиальная схема реактора пиролиза (а) и расчетная сетка (б)

Разработанная модель может быть использована при модификации и масштабировании экспериментальных установок термохимической конверсии. Также, разработанная модель может быть применена для решения задачи по поиску оптимальных режимов работы реактора пиролиза с целью получения наибольшего выхода биоугля или синтез-газа с максимальной теплотворной способностью при минимальном образовании смолы. Для большей точности и устойчивости в дальнейших исследованиях модель будет оснащена более комплексной моделью реакций. Применение полученной математической модели и ее дальнейшее улучшение необходимы для оптимизации работы установок термохимической конверсии в рамках гибридных энергосистем.

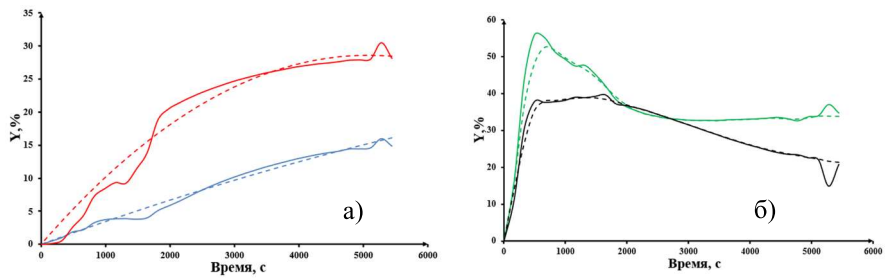


Рисунок 5 – Сопоставление результатов моделирования (пунктирные линии) и экспериментальных значений (сплошные линии) по образованию H₂ (синий цвет), CH₄ (красный) (а) и CO (черный), CO₂ (зеленый) (б) при пиролизе биомассы, где Y – процентное содержание компонента в смеси

Таким образом, в третьей главе приведено описание математической и компьютерных моделей реактора термохимической конверсии, а также приведено сравнение результатов вычислительного и натурального экспериментов. Показаны аналитические выводы о применимости и дальнейшем развитии модели. Для верификации математической модели было проведено экспериментальное исследование на лабораторном реакторе пиролиза. Описаны результаты исследования образцов лигноцеллюлозной биомассы, применяемой в качестве топлива. Приведены результаты элементного, технического и термогравиметрического анализ, а также данные масс-спектрометрического исследования. На основе данных термического анализа и масс-спектрометрии были рассчитаны кинетические коэффициенты выделения газообразных компонентов конверсии биомассы путем применения модифицированного метода Коутса-Редферна. Приведено подробное описание моделируемого реактора и данные экспериментального исследования.

В четвертой главе описано исследование работы гибридной микросети с газогенераторной электростанцией, работающей на двух видах газового топлива: модельной смеси, предполагающей максимальную калорийность и низкокалорийного синтез-газа. Описана структура исследуемой микросети, возникающие в ходе ее эксплуатации проблемы. Приведено описание разработанной системы мониторинга данных микросети.

Опытная лабораторная установка, являющаяся гибридной микросетью, состоит из следующих компонентов (Рисунок 6): фотоэлектрические преобразователи (ФЭП); газогенератор; функционирующий на синтез-газе электрогенератор; блок аккумуляторов; комплекс управления; система мониторинга. Газогенератор, использующий в качестве сырья биомассу, включает в себя реакторную зону, нагревательные элементы, система смолы улавливания и фильтрации смол, системы подачи газа. В качестве газовой среды может быть подан окислитель, инертный газ или процесс может проводиться без дополнительной подачи газа. Биомасса помещается внутрь реактора на колосниковую решетку. Газ, выделяемый в результате термохимической конверсии, проходит через несколько ступеней очистки и попадает в узел генерации электроэнергии. В качестве генератора электроэнергии в микросети используется электрогенератор KRONWERK LK-1500. Поскольку изначально генератор предназначен для работы на бензиновом топливе, его системы впуска и зажигания были адаптированы под синтез-газ. В качестве управляющего элемента используется многофункциональный инвертор SILA V 1000P, включающий в себя также функции зарядного устройства и управляющего устройства для фотовольтаических элементов. Мощность устройства – 1 кВт.

Узел управления, состоящий из инвертора и подключенного к нему компьютера, оснащен программным обеспечением Watchpower. Микросеть также содержит узел, использующий солнечную энергию. В основе этого узла лежат фотовольтаические элементы SilaSolar SIM280 (5BB). Общая выходная мощность элементов – 0,56 кВт. Расположение элементов выбрано с учетом близости к остальным элементам микросети, при достижении наибольшей освещенности в таких условиях.

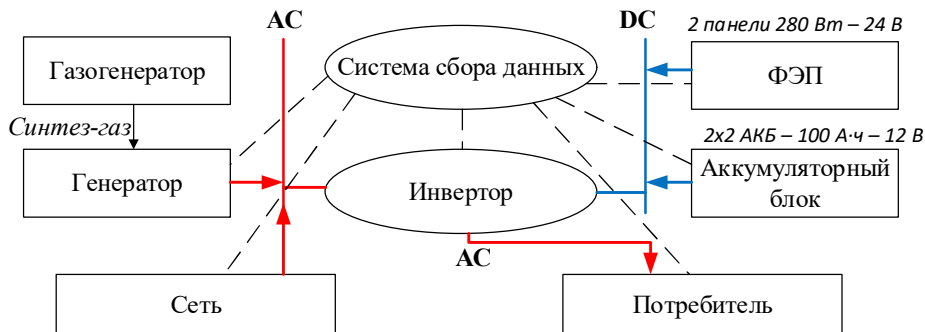


Рисунок 6 – Принципиальная схема микросети, где ФЭП – фотоэлектрические преобразователи, АС и DC – линии переменного и постоянного тока, пунктирные линии – информационные потоки

Фотовольтаические элементы не оснащены системой изменения угла для поддержания максимально эффективного расположения, поскольку отсутствие такого механизма в масштабах опытной сети не препятствует проведению исследований. Постоянным потребителем для микросети являются осветительные приборы и вентиляция служебного помещения, в ходе экспериментов добавлялась дополнительная нагрузка.

По причине того, что возможность графического представления и доступа к ключевым параметрам гибридной микросети имеет большую важность, была создана система мониторинга. Система передачи данных реализована через внутреннюю сеть организации ИСЭМ СО РАН (URL: <https://isem.irk.ru/microgrid>). В диссертационной работе представлен акт о внедрении системы мониторинга. Разработанная система мониторинга для гибридной микросети лабораторного масштаба позволяет осуществлять контроль и аналитические исследования, на основе которых могут быть сформированы прогностические рекомендации. На Рисунке 7 показан алгоритм работы системы мониторинга.

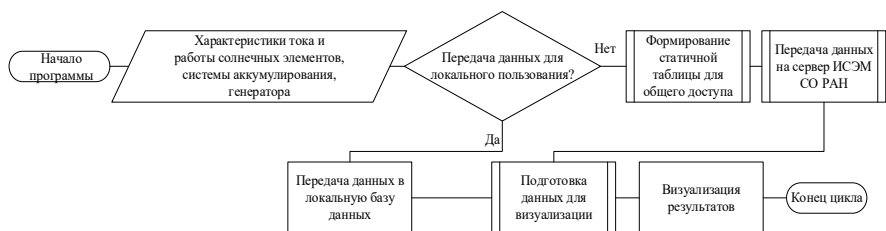


Рисунок 7 – Логическая схема взаимодействия с данными о работе микросети

В ходе проектирования и исследования энергосистем необходимо осуществить сравнение показателей работы системы на исследуемом и модельном (эталонном) топливах. Для этого были осуществлены экспериментальные запуски узла генерации энергии с использованием модельного топлива. В качестве модельного топлива использовалась пропан-бутановая смесь в соотношении 1:1. Характеристики топлива указаны в Таблице 3.

Таблица 3. Характеристики использованных топлив

Компонент синтез-газа	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	H ₂	CH ₄	CO	CO ₂	N ₂
Объемная доля, %	0,964	0,959	17,26	4,26	17,28	13,09	46,187
Низшая теплота сгорания синтез-газа, Дж/м ³ · 10 ⁶							6,68
Низшая теплота сгорания пропан-бутановой смеси, Дж/м ³ · 10 ⁶							105,35

В ходе эксперимента фиксировалась температура выхлопа электрогенератора и температура на радиаторе двигателя с помощью устройства регистрации температуры. Также производился анализ состава выхлопных газов – регистрировалась мольная доля (выраженная в процентах) с помощью газового хроматографа. Результаты расчетов мощности и коэффициента избытка воздуха для пропан-бутановой смеси приведены на Рисунке 8.

Измерение мольной доли кислорода в выхлопе необходимо для расчетов коэффициента избытка воздуха, являющегося одним из параметров эффективности процесса. Коэффициент избытка воздуха для пропан-бутановой смеси после выхода двигателя генератора на стационарный режим варьировался в диапазоне 1,19 – 1,28. Для синтез-газа коэффициент избытка воздуха после выхода на режимные показатели варьировался в диапазоне 1,12 – 1,35. Одним из ключевых показателей при анализе энергосистем является электрический КПД. Для пропан-бутановой смеси средний показатель электрического КПД составил

27,99%, а для синтез-газа 22,59%. Результаты расчетов мощности и коэффициента избытка воздуха для синтез-газа приведены на Рисунке 9.

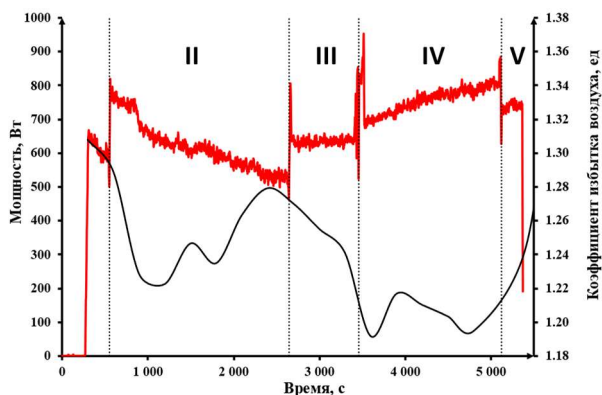


Рисунок 8 – Результаты расчета электрической мощности для пропан-бутановой смеси. Красной линией показана мощность, черной – коэффициент избытка воздуха

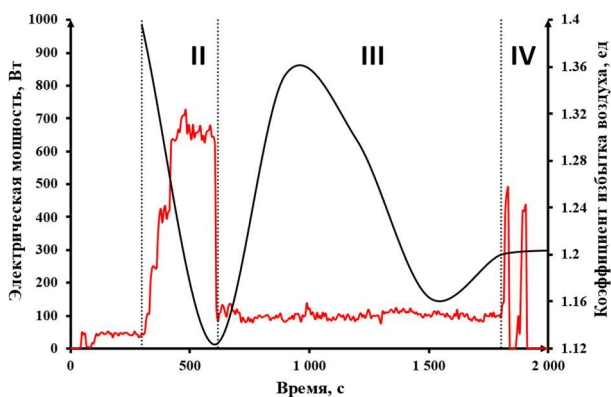


Рисунок 9 – Результаты расчета электрической мощности для синтез-газа. Красной линией показана мощность, черной – коэффициент избытка воздуха

Таким образом, были проведены тестовые эксперименты на установке с генератором электроэнергии с использованием синтез-газа, полученного путем термохимической конверсии биомассы, содержащей фотоэлектрические

преобразователи. Были проведены запуски системы как на модельной пропан-бутановой смеси, так и на синтез-газе. Проанализировано поведение узла генерации с использованием газовых топлив, поведение ФЭП и основные электрические характеристики системы. Рассматриваемая система, не смотря на низкий КПД преобразования газового топлива, имеет ряд преимуществ – использование ВИЭ для генерации энергии, независимость от внешних условий, неограниченную сырьевую базу, доступность для населенных зон с децентрализованным энергоснабжением. Применение комбинации солнечной энергии и конверсии биомассы позволяет восполнить недостатки обоих источников энергии и повысить стабильность энергосистемы.

В заключении данной работы сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Разработана модификация метода Коутса-Редферна, предназначенная для анализа кинетических коэффициентов для реакций образования отдельных газообразных компонентов при термохимической конверсии образцов биомассы. Модифицированный метод объединяет данные термогравиметрического исследования и данные масс-спектрометрии с кинетическим анализом и позволяет получить новые данные о кинетике термохимической конверсии.
2. Сформирована математическая модель реактора пиролиза биомассы на базе пакета вычислительной гидродинамики, использующая новые данные, полученные модифицированным методом Коутса-Редферна и экспериментальные данные.
3. Проведено экспериментальное исследование, в ходе которого получены новые данные о работе генератора с использованием низкокалорийного синтез-газа, которые отражают оптимальные режимы работы электрогенератора и диапазон значений качества газа (состав, теплота сгорания).
4. Разработано программное обеспечение для проведения аналитических исследований на основе данных о функционировании гибридной микросети лабораторного масштаба, использующей возобновляемые источники энергии, в том числе газогенераторную электростанцию на древесных отходах.
5. Разработано программное обеспечение, направленное на оптимизацию процесса исследования свойств термохимической конверсии биомассы с помощью комплексов термического анализа путем предобработки и постобработки данных.

В работе рассмотрены технологии термохимической конверсии биомассы, их особенности и целевые продукты. Также рассмотрен крайне актуальный инструмент исследования в области термохимической конверсии – синхронный термический анализ. Описаны компоненты и принципы

использования этого инструмента, а также показаны примеры его применения. Рассмотрены методы решения обратной задачи кинетики.

Приведенные в работе математические модели процессов термохимической конверсии биомассы – как в рамках модифицированного численного метода, так и в рамках модели на основе вычислительной гидродинамики, могут быть использованы для определения оптимальных режимов работы, масштабирования и модификации опытных реакторов. Кинетические данные, полученные в работе, могут быть применены для моделирования термохимических процессов конверсии биомассы и их отдельных этапов.

Разработан программно-вычислительный комплекс, направленный на обработку данных термогравиметрии и масс-спектрометрии с помощью модифицированного метода Коутса-Редферна. Разработанное программное решение может быть использовано для повышения эффективности работы с массивами экспериментальных данных при кинетическом анализе свойств твердых топлив, в том числе биомассы. Также решена практическая задача по разработке системы мониторинга опытной гибридной микросети, включающей в себя реактор термохимической конверсии и фотоэлектрические преобразователи.

В работе рассмотрены мультэнергетические системы малого масштаба – гибридные микросети, основанные на возобновляемых источниках энергии, в том числе биомассе. Представленные экспериментальные данные об использовании низкокалорийного синтез-газа, являющегося продуктом конверсии биомассы, в качестве топлива для компонента гибридной микросети и влияния на остальную энергосистему могут быть использованы для повышения энергоэффективности и масштабирования таких систем. Накоплению массивов данных и их аналитическому исследованию способствует разработанная система мониторинга.

Дальнейшие направления развития работы заключаются в следующем: создание базы данных кинетических коэффициентов, полученных в ходе термогравиметрического исследования, совмещенного с масс-спектрометрией, посредством применения модифицированного метода Коутса-Редферна, с целью выявления закономерностей характеристик топлив, а также с целью уточнения и улучшения численного метода. Уточнение и расширение разработанной математической модели посредством замены аппроксимаций на соответствующие описательные уравнения, повышение устойчивости модели. Разработка аналогичной модели для других масштабов установок конверсии. Повышение энергоэффективности гибридной микросети и исследование экономических показателей ее масштабированных модификаций. Расширение программного комплекса по обработке данных термогравиметрии посредством добавления различных методов кинетического анализа для проведения

сравнительных исследований. Дополнение системы мониторинга гибридной микросети расширенными функциями.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, рекомендуемых ВАК:

1. Баденко, В. В. Валидация CFD-модели реактора пиролиза с использованием данных термогравиметрического анализа и масс-спектрометрии / В. В. Баденко, А. Н. Козлов, М. В. Пензик // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2025. – № 2 (38). – С. 90-102.
2. Gubiy, E. V. Production of Refuse-Derived Fuel Pellets from Wood and Agricultural Waste: Technological Solutions and Economic Efficiency / E. V. Gubiy, M. V. Penzik, V. V. Badenko, A. N. Kozlov // Energy Systems Research. – 2025. – Vol. 8, no. 4. – pp. 65-77.
3. Badenko, V. V. Temperature-Dependent Pyrolysis of Wood Chips in a Fixed-Bed Reactor: Effects on Syngas and Charcoal Yield and Quality / V. V. Badenko, M. V. Penzik, E. V. Gubiy, A. N. Kozlov // Energy Systems Research. – 2025. – Vol. 8, no. 3. – pp. 57-69.
4. Баденко, В. В. Первичный анализ работы гибридной микросети лабораторного масштаба посредством системы мониторинга / В. В. Баденко, А. Н. Козлов // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2024. – № 3 (35). – С. 73-81.

Статьи в журналах, входящих в базы Web of Science и Scopus:

1. Penzik, M. V. A method for hydrogen-enriched syngas production from biomass via induction heating / M. V. Penzik, S. Zhang, V. V. Badenko, B. Li, A. N. Kozlov // Fuel. – 2025. – Vol. 382. – P. 133817.
2. Badenko, V. Kinetic and quantitative analysis of gaseous products of thermochemical biomass conversion based on thermogravimetric and mass-spectrometric data / V. Badenko, I. Sosnovsky, A. Kozlov, M. Penzik, S. Zhang // Biofuels, Bioproducts and Biorefining. – 2024. – Vol. 18, no. 5. – pp. 1254-1266.
3. Penzik, M. V. A segmental analysis of pyrolysis of woody biomass / M. V. Penzik, A. N. Kozlov, S. Zhang, V. V. Badenko, I. K. Sosnovsky, V. A. Shamansky // Thermochimica Acta. – 2022. – Vol. 711. – P. 179209.

Материалы конференций:

1. Badenko, V. Application of information and computing systems in a hybrid power grid / V. Badenko, A. Kozlov // Proceedings of the 7th International Workshop on Information, Computation, and Control Systems for Distributed Environments (ICCS-DE 2025), Irkutsk, 07–11 июля 2025 года. – Irkutsk: Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2025. – pp. 146-148.

2. Badenko, V. V. Kinetic analysis of biomass combustion products formation in TG-MS / V. V. Badenko, A. N. Kozlov, I. K. Sosnovsky // Science Present and Future: Research Landscape in the 21st century: multidisciplinary youth academic research conference, Иркутск, 18 мая 2023 года. – Иркутск: ФГБУН ИНЦ СО РАН, 2023. – pp. 29-30.
3. Sosnovsky, I. K. Study of operation modes of a hybrid microgrid with a renewable energy source / I. K. Sosnovsky, V. V. Badenko // Science Present and Future: Research Landscape in the 21st century: multidisciplinary youth academic research conference, Иркутск, 18 мая 2023 года. – Иркутск: ФГБУН ИНЦ СО РАН, 2023. – pp. 25-27.
4. Сосновский, И. К. Исследование режимов работы гибридной микросети / И. К. Сосновский, В. В. Баденко, М. В. Пензик, А. Н. Козлов // Повышение эффективности производства и использования энергии в условиях Сибири : Материалы Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Иркутск, 19–23 апреля 2023 года. Том 1. – Иркутск: ИРНТУ, 2023. – С. 415-419.
5. Баденко, В. В. Синтез изоморфно-замещенных цеолитов с топологией MFI / В. В. Баденко, И. К. Сосновский, С. А. Скорникова // IV Байкальский материаловедческий форум: Материалы Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Улан-Удэ, 01–07 июля 2022 года. – Улан-Удэ: БНЦ СО РАН, 2022. – С. 233.
6. Баденко, В. В. Количественная оценка состава летучих веществ на основе данных масс-спектрометрии / В. В. Баденко, И. К. Сосновский // Актуальные проблемы химии, биотехнологии и сферы услуг: Материалы VI Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Иркутск, 28–30 апреля 2022 года. – Иркутск: Иркутский национальный исследовательский технический университет, 2022. – С. 27-30.
7. Сосновский, И. К. Анализ кинетических параметров различных видов биомассы методом ASTM E698 / И. К. Сосновский, В. В. Баденко // Актуальные проблемы химии, биотехнологии и сферы услуг: Материалы VI Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Иркутск, 28–30 апреля 2022 года. – Иркутск: ИРНТУ, 2022. – С. 243-247.
8. Баденко, В. В. Численное моделирование реактора пиролиза / В. В. Баденко, И. К. Сосновский // Перспективы развития технологии переработки углеводородных и минеральных ресурсов: Материалы XI Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Иркутск, 22–23 апреля 2021 года. – Иркутск: ИРНТУ, 2021. – С. 96-98.
9. Сосновский, И. К. Кинетика пиролиза торрефицированной древесной биомассы / И. К. Сосновский, В. В. Баденко // Актуальные проблемы химии, биотехнологии и сферы услуг: V Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участ., Иркутск, 21–23 апреля 2021 года. – Иркутск: ИРНТУ, 2021. – С. 45-47.

Результат интеллектуальной деятельности:

1. Баденко, В. В. Определение кинетических коэффициентов образования газовых компонентов при термохимической конверсии твердых топлив путем обработки масс-спектрометрических данных / В. В. Баденко, А. Н. Козлов, И. К. Сосновский // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024611908. Правообладатель ФГБУН ИСЭМ СО РАН. № 2024610731; заявл. 16.01.2024; зарегистр. 25.01.2024. Бюл. № 2.

Подписано в печать 22.04.2026 г.

Формат А5. Бумага офсетная.

Усл. печ. л. 1,75. Тираж 100 экз. Заказ № 63

Отпечатано в Центре печати С+

664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 128