

УДК 004.89

DOI:10.25729/ESI.2026.41.1.004

Интеллектуальная система анализа данных процесса пиролиза биомассы

Бачурин Роман Михайлович, Захарова Ирина Гелиевна

Тюменский государственный университет, Россия, Тюмень, romanbachurin@gmail.com

Аннотация. В статье представлены результаты исследования, направленного на разработку и программную реализацию методов математического моделирования процесса пиролиза растительной биомассы. Основная цель работы заключается в создании интеллектуальной системы анализа экспериментальных данных, которая позволяет исследовать технологические параметры процесса пиролиза. Ключевые компоненты разработанной системы включают: комплекс моделей машинного обучения (значения метрик качества моделей $RMSE < 3.9$, $R^2 > 0.8$) для прогнозирования выхода конечных продуктов пиролиза; инструменты анализа кривых дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и оценки теплового эффекта реакций; подсистему идентификации и визуализации термогравиметрических (ТГ) и ДСК кривых. Обучение прогнозных моделей проводилось на выборке (750 записей), составленной из открытых наборов данных о натуральных экспериментах пиролиза растительного сырья. В качестве целевых переменных выступали процентное содержание твердых, жидких и газообразных веществ в конечных продуктах пиролиза. Независимые переменные включали физико-химические характеристики сырья и параметры процесса пиролиза. Практическая значимость исследования определяется возможностью более глубокого понимания процессов разложения биомассы. Разработанная система предоставляет исследователям и технологам комплексные инструменты для анализа и идентификации ДСК кривых, что облегчает интерпретацию экспериментальных данных. Научная новизна работы заключается в создании единой платформы поддержки исследований на основе интеграции методов машинного обучения с традиционными подходами к анализу процесса пиролиза. Это дает возможность существенно повысить точность прогнозирования и оптимизировать процесс пиролиза с точки зрения получения конечных продуктов. Результаты исследования могут найти применение в научных исследованиях в области термохимических процессов, в прикладной биоэнергетике, химической промышленности и других областях, связанных с переработкой биомассы методом пиролиза. Перспективы развития системы связаны с расширением базы данных ДСК кривых, улучшением алгоритмов машинного обучения и интеграцией дополнительных методов анализа экспериментальных данных для детальной интерпретации процесса пиролиза с учетом его динамики.

Ключевые слова: пиролиз биомассы, математическое моделирование, машинное обучение, нейронные сети, дифференциальная сканирующая калориметрия

Цитирование: Бачурин Р.М. Интеллектуальная система анализа данных процесса пиролиза биомассы / Р.М. Бачурин, И.Г. Захарова // Информационные и математические технологии в науке и управлении, 2026. – № 1(41). – С. 59-67 – DOI:10.25729/ESI.2026.41.1.004.

Введение. Интеллектуальные системы анализа данных становятся ключевыми инструментами в современных исследованиях термохимических процессов [1]. В частности, такие программные продукты широко применяются для исследования процесса пиролиза растительного сырья [2]. Пиролиз биомассы – это термическое разложение органических материалов в отсутствие кислорода, приводящее к образованию ценных продуктов: биоугля, бионефти и синтез-газа. Пиролиз растительного сырья является перспективным направлением исследований для устойчивого управления отходами и производства возобновляемой энергии [3]. Эффективность пиролиза зависит от точного контроля параметров процесса, таких, как температурные режимы и тепловые эффекты. Тепловые эффекты процесса отражаются в данных термогравиметрического анализа (ТГА) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) [4].

Анализ ДСК кривых позволяет оценить термическое поведение биомассы при различных температурах и условиях, что необходимо для оптимизации процесса пиролиза и получения его целевых продуктов. Термический анализ ДСК является важным инструментом для изучения процесса пиролиза [5]. Этот метод позволяет определить температурные диапазоны, в которых происходят основные стадии разложения биомассы [6]. Кривые ДСК

предоставляют информацию об эндотермических и экзотермических процессах, что помогает понять кинетику реакций пиролиза и оптимизировать условия для получения желаемых конечных продуктов [7]. На основе данных ТГА и масс-спектрометрии возможно определение кинетических коэффициентов для математического моделирования процессов в реакторе, включая как валидацию моделей [8], так и кинетический анализ выхода конечных продуктов пиролиза [9].

Применение интеллектуальных методов анализа данных, включая классические алгоритмы машинного обучения и нейросетевые подходы, открывает новые возможности для решения важной задачи, связанной с анализом данных процесса пиролиза [10], а именно, речь идет о задачах прогнозирования выхода конечных продуктов пиролиза, определения оптимальных условий процесса и интерпретации больших объемов данных, полученных с помощью термического анализа [11]. Для автоматизации анализа экспериментальных данных было бы целесообразно объединить в рамках интеллектуальной системы возможности решения вышеперечисленных задач.

Целью настоящей работы является разработка и программная реализация методов математического моделирования процесса пиролиза растительной биомассы в составе специализированной интеллектуальной системы. Особое внимание уделено решению следующих ключевых задач моделирования: прогнозирование выхода конечных продуктов пиролиза, вычисление энтальпии процесса и идентификация ДСК кривых.

1. Прогнозирование выхода конечных продуктов. Для прогнозирования выхода конечных продуктов пиролиза биомассы с высокой точностью применяются современные методы машинного обучения [12], в первую очередь, ансамблевые методы, такие, как случайный лес [13]. Также находит широкое применение и нейросетевой подход [12-14]. Это позволяет эффективно моделировать процесс выхода продуктов пиролиза. Для решения задачи прогнозирования система предоставляет заранее обученные модели – как классические, так и нейросетевые. В качестве обучающей выборки для построения моделей были использованы данные о выходе конечных продуктов в ходе пиролиза растительного сырья из открытых источников [15-17]. В этом наборе данных представлены значения следующих физико-химических характеристик сырья и параметров процесса пиролиза: влажность (%), зольность (%), выход летучих продуктов (%), фиксированный углерод (%), доля углерода в сырье (%), доля водорода в сырье (%), доля кислорода в сырье (%), доля азота в сырье (%), размер частиц сырья (мм), конечная температура процесса пиролиза (°C), скорость нагревания биомассы (°C / мин), скорость пропускания инертного газа (мл / мин). Целевыми переменными для прогнозирования являются: выход твердых веществ; выход жидких веществ, включая смолу и воду; выход газа в процентном соотношении. Набор данных содержит 750 записей о натуральных экспериментах пиролиза растительного сырья. Для прогнозирования этих значений были обучены регрессионные модели. В качестве метрик качества для оценки моделей использовались среднеквадратическая ошибка (RMSE) и коэффициент детерминации (R^2) [13], значения которых указаны в таблице 1.

Таблица 1. Метрики качества моделей прогнозирования продуктов пиролиза

Модель прогнозирования	Метрики качества модели машинного обучения	
	RMSE	R^2
LightGBM Regressor	3,7253	0,8048
Extra Trees Regressor	3,1809	0,8688
Bagging Regressor	3,7126	0,8239
XGBoost Regressor	3,6829	0,8112
Нейросетевая модель	3,8854	0,8059

Модели LightGBM, Extra Trees Regressor, Bagging Regressor, XGBoost являются ансамблевыми моделями, основанными на деревьях решений. Для ансамблевых моделей, продемонстрировавших наилучшие показатели качества, осуществлялась ручная оптимизация гиперпараметров. В процессе настройки варьировались следующие параметры: глубина решающих деревьев, количество деревьев в ансамбле, а также число признаков, учитываемых при каждом разбиении узла. Нейросетевая модель представляет собой полносвязную искусственную нейронную сеть с 2 скрытыми слоями (36 и 12 нейронов соответственно).

В работе применялся метод *k*-блочной кросс-валидации, при котором исходный набор данных был разделен на 10 равных частей. На каждой итерации одна из этих частей выступала в роли тестовой выборки для оценки качества модели, а оставшиеся 9 частей использовались для её обучения. Такой подход позволяет более объективно оценить обобщающую способность модели и снижает воздействие случайного разбиения данных на полученные результаты. В итоге были вычислены средние показатели качества модели по всем блокам, что обеспечивает надёжную и всестороннюю оценку её прогностической эффективности. Этот метод даёт возможность проверять модель на разных подмножествах данных, уменьшая риск переобучения и недообучения, и является общепринятой практикой при ограниченности данных.

2. Вычисление энтальпии процесса пиролиза. Вычисление значений этой важной характеристики иллюстрируется в интерфейсе системы в соответствии с принятым у исследователей эмпирическим методом. В качестве исходных данных используются ряды экспериментальных значений: время (мин), температура (°C), ДСК (мВт / мг), экспортированных с приборов (в частности, таких как NETZSCH STA 449 F5 [18]) и представленных в виде текстовых файлов.

Данные ДСК подвергаются сглаживанию для подавления высокочастотного шума, препятствующего корректному определению значений производных и точек изменения кривизны. Для этого применяется фильтр Савицкого-Голея [19], позволяющий сохранить форму сигналов при фильтрации. Для получения более глубокой информации о характере тепловых процессов анализ не ограничивается первичной интерпретацией ДСК-кривой. Выполняются дополнительные вычисления. Первая производная ДСК-кривой отражает скорость изменения теплового эффекта. Вторая производная позволяет выявить точки перегиба, критические для локализации начальных и конечных фаз реакций [20]. Алгоритм находит такие точки, используя нули второй производной, дополнительно применяя температурные фильтры для исключения недостоверных точек. На основе найденных точек строятся сегменты между парами, для которых кривая ДСК остаётся выше прямой, соединяющей точки. Такие сегменты трактуются как выпуклые области интереса – их анализ позволяет оценить термодинамическую значимость процессов. Далее осуществляется группировка перекрывающихся сегментов и определение "главных линий" – наибольших по температурному интервалу отрезков, проходящих через важнейшие события.

Для оценки энергетического эффекта каждого процесса выполняется численное интегрирование между кривой ДСК и линией, соединяющей точки главного сегмента. Для это применяется численный метод Симпсона [21] с шагом интегрирования 0.2, обеспечивающий высокую точность оценки площади под кривой:

$$Area = \int_{T_1}^{T_2} (f_{DSC}(T) - f_{line}(T))dT,$$

где T_1 и T_2 – температуры, соответствующие началу и концу рассматриваемого сегмента; $f_{DSC}(T)$ – экспериментальное значение ДСК-сигнала при температуре T ;

$f_{line}(T)$ – ордината прямой, соединяющей точки T_1 и T_2 ;

$Area$ – искомая площадь, значение которой равно тепловому эффекту процесса.

Площадь интерпретируется, как тепловой эффект, сопровождающий этот процесс. Помимо численного значения, строится полигон, описывающий форму области на графике, что позволяет визуализировать эти регионы в виде закрашенных участков.

3. Идентификация ДСК кривых. Под идентификацией кривых здесь понимается поиск наиболее близкой (к данной) ДСК кривой из числа заранее импортированных (эталонных) кривых. В настоящее время в базу данных системы загружены 8 ДСК кривых для различных видов сырья. При идентификации материалов на основе данных термического анализа, в частности, по кривым газовой выделения, используются сигналы масс-спектрометра, представленные в формате QMID(s:1|m:X)/A, где X – значение отношения масса/заряд (m/z) для конкретного иона (например, $m:16$, $m:28$, $m:44$ и др.), по которым определяется значение метрики схожести MSE. Кроме того, система позволяет исследователю визуально оценить особенности кривых для различного сырья (рисунок 1).

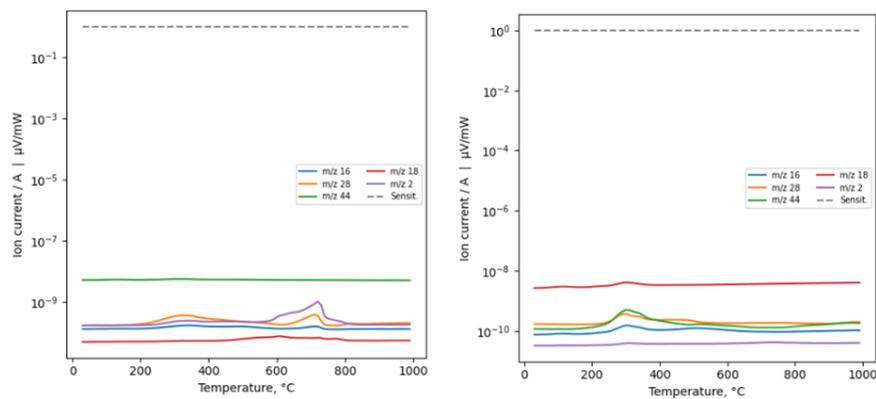


Рис. 1. Интерфейс системы: показания масс-спектрометра для торфа (слева) и отрубей (справа)

Эти сигналы соответствуют фрагментам молекул таких газов, как O_2 , CO , CO_2 , H_2O и др., образующихся при термическом разложении вещества. Соответственно, требуется количественно оценить степень сходства между анализируемым и эталонным образцами. Такая задача в общем случае сводится к сравнению многомерных временных рядов (в настоящей работе – зависимости интенсивности сигнала от температуры) с последующим выбором наилучшего совпадения.

При сравнении новой загруженной кривой, представляющей временные ряды с вышеуказанными признаками масс-спектрометрии, в систему, происходит поиск в базе данных системы наиболее схожей кривой, то есть, имеющей минимальное значение метрики для соответствующих признаков. Для сравнения временных рядов применяются различные метрики для оценки сходства. В этом исследовании была использована среднеквадратичная ошибка (MSE).

Различные виды биомассы, такие, как древесина, сельскохозяйственные отходы и водоросли, имеют различные химические составы и термические характеристики, что влияет на процесс их пиролиза [22]. Исследования термического поведения различных видов биомассы с использованием ТГА и ДСК позволяют определить оптимальные условия для их переработки в энергию и ценные химические вещества.

4. Интерфейс интеллектуальной системы. Система представлена в виде монолитного веб-приложения, серверная часть которого разработана на языке Python с использованием фреймворка Django. Клиентская часть веб-приложения реализована средствами фреймворка React. Интерфейс системы представлен на примере исследования одной из задач – вычисления

энтальпии процесса пиролиза (рисунок 2). График отображения кривой ДСК является интерактивным, позволяя выбирать исследователю отображение различных кривых, точек и сегментов. В таблице точек исследователь имеет возможность удалить точки событий и пересчитать линии и области. Также исследователю предоставлена возможность удалить найденные линии с автоматическим удалением соответствующих этим линиям точек событий, которые являются началом и концом. Элементы управления для пересчета линий, экспорта точек событий и областей с вычисленной энтальпией представлены с помощью button. Изменять коэффициент сглаживания исследователь может путём его числового изменения в соответствующем элементе управления, представленным компонентом типа «Textbox».

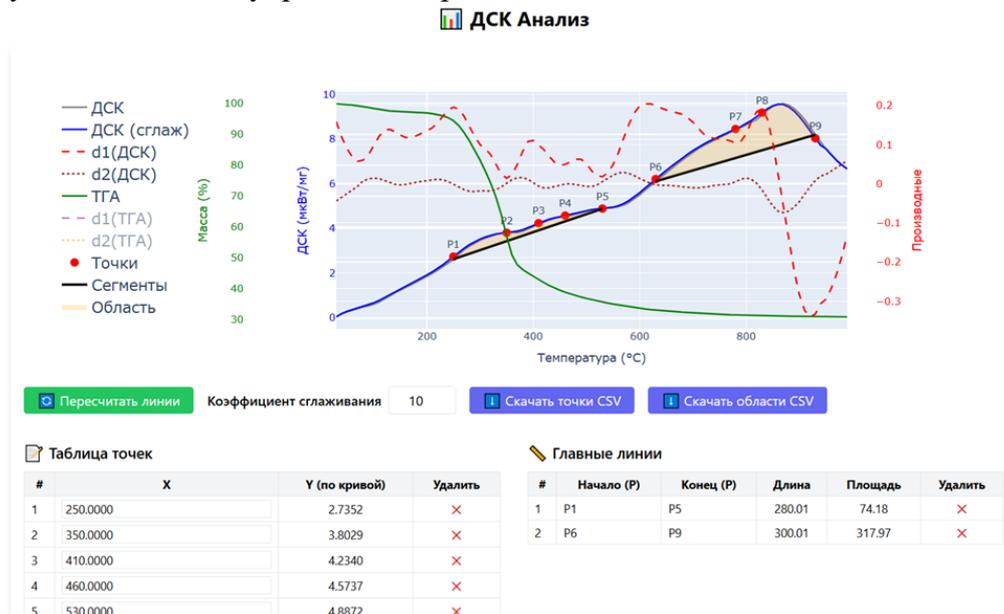


Рис. 2. Интерфейс задачи вычисления энтальпии процесса пиролиза

Исследователю предоставлены следующие возможности:

1. Визуализация ТГА и ДСК кривых.
2. Визуализация значений первой и второй производных ТГА и ДСК кривых.
3. Определение точек событий (список координат всех точек событий).
4. Визуализация главных линий (сегментов), где каждая строка – это отрезок между двумя точками.
5. Расчет энтальпии процесса.
6. Изменение коэффициента сглаживания (окно фильтра Савицкого-Голея).
7. Удаление или добавление точек событий.
8. Пересчет сегментов и площади (нажатием на кнопку "Пересчитать линии").
9. Экспорт таблицы точек в csv-файл.

Рисунок 2 иллюстрирует вычисление энтальпии в случае, когда имеются 9 точек событий (P1, P2 и т. д.). В ходе вычислений определяются 2 главных линии (сегмента) от P1 до P5, от P6 до P9, отделяющих 2 области тепловых эффектов. При этом отображаются начало и конец сегмента (черные линии на графике). Представлены также графики первой (d1) и второй (d2) производных ДСК-кривой пунктирными линиями. В соответствии с представленными возможностями системы пользователь может корректировать ключевые значения. Все значения пересчитываются в реальном времени, график обновляется без перезагрузки.

Заключение. Разработанная интеллектуальная система показала эффективность в задачах моделирования выхода продуктов пиролиза растительной биомассы, сочетая методы машинного обучения и математического моделирования. Внедрение моделей с высокими

значениями метрик качества ($RMSE < 3.9$, $R^2 > 0.8$) обеспечивает надёжное прогнозирование выхода конечных продуктов пиролиза. Особое внимание было уделено созданию инструментов для автоматизированного анализа и идентификации ДСК кривых, что способствует оцениванию тепловых эффектов пиролиза и оптимизации технологических параметров процессов переработки сырья. Возможности визуализации данных ТГА и ДСК облегчают исследователям анализ данных по результатам натуральных экспериментов, что во многом определяет качество интерпретации этих данных и, соответственно, углублённое понимание процессов термического разложения биомассы. Представленная интеллектуальная система находится в процессе развития. В первую очередь это увеличение объема обучающей выборки и расширение базы эталонных ДСК кривых для различных типов сырья и характеристик самого процесса. Эти данные напрямую влияют на возможности совершенствования моделей для прогнозирования параметров процесса пиролиза в динамике. Такая интеграция в систему дополнительных методов интерпретации экспериментальных данных для детального моделирования процесса позволит ей стать важным инструментом для поддержки научных исследований в области прикладных задач совершенствования и оптимизации технологий термической переработки растительного сырья.

Благодарности. Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта "Фундаментальные проблемы методики разработки и связанного с ней правового и этического регулирования в сфере применения систем и моделей искусственного интеллекта" (FEWZ-2024-0052).

Список источников

1. Ogunsola, N.O., Oh, S.S., Jeon, P.R., et al. Progresses and challenges of machine learning approaches in thermochemical processes for bioenergy: a review. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2024, vol. 41, no. 7, pp. 1923–1953, DOI: 10.1007/s11814-024-00181-7.
2. Khan M., Raza Naqvi S., Ullah Z. et al. Applications of machine learning in thermochemical conversion of biomass - a review. *Fuel*, 2023, vol. 332, p. 126055, DOI: 10.1016/j.fuel.2022.126055.
3. Fahmy T.Y.A., Fahmy Y., Mobarak F. et al. Biomass pyrolysis: past, present, and future. *Environment, Development and Sustainability*, 2018, vol. 22, no. 1, pp. 17–32, DOI: 10.1007/s10668-018-0200-5.
4. Chen Q., Yang R., Zhao B. et al. Investigation of heat of biomass pyrolysis and secondary reactions by simultaneous thermogravimetry and differential scanning calorimetry. *Fuel*, 2014, vol. 134, pp. 467–476, DOI: 10.1016/j.fuel.2014.05.092.
5. Călin C., Sîrbu E.-E., Tănase M. et al. Thermogravimetric analysis of biomass conversion to biochar: experimental and kinetic modeling. *Applied Sciences*, 2024, vol. 14, no. 21, p. 9856, DOI: 10.3390/app14219856.
6. Ameh V.I., Ayeleru O.O., Nomngongo P.N. et al. Bio-oil production from waste plant seeds biomass as pyrolytic lignocellulosic feedstock and its improvement for energy potential: a review. *Waste Management Bulletin*, 2024, vol. 2, no. 2, pp. 32–48, DOI: 10.1016/j.wmb.2024.03.002.
7. Díaz I., Rodríguez M., Arnaiz C. et al. Biomass pyrolysis kinetics through thermogravimetric analysis. In *Computer Aided Chemical Engineering*, 2013, pp. 1–6, DOI: 10.1016/b978-0-444-63234-0.50001-4.
8. 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. – Т. 38, № 2. – С. 90-102. – DOI: 10.25729/ESI.2025.38.2.008.
9. Badenko V., Sosnovsky I., Kozlov A. et al. Kinetic and quantitative analysis of gaseous products of thermochemical biomass conversion based on thermogravimetric and mass-spectrometric data. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 2024, vol. 18, no. 5, pp. 1254-1266, DOI: 10.1002/bbb.2616.
10. Akinpelu D.A., Adekoya O.A., Oladoye P.O. et al. Machine learning applications in biomass pyrolysis: from biorefinery to end-of-life product management. *Digital Chemical Engineering*, 2023, vol. 8, p. 100103, DOI: 10.1016/j.dche.2023.100103.
11. Chen Q., Xue P., Yang Z. et al. Machine learning for product distribution prediction of one-step pyrolysis model of coal. *Journal of the Energy Institute*, 2025, vol. 121, p. 102152, DOI: 10.1016/j.joei.2025.102152.

12. Rahimi M., Mashhadimoslem H., Vo Thanh H. et al. Yield prediction and optimization of biomass-based products by multi-machine learning schemes: neural, regression and function-based techniques. *Energy*, 2023, vol. 283, p. 128546, DOI: 10.1016/j.energy.2023.128546.
13. Balsora H.K., S K., Joshi J.B. et al. Artificial neural network-based models for the prediction of biomass pyrolysis products from preliminary analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, vol. 62, no. 37, pp. 14934-14943, DOI: 10.1021/acs.iecr.3c01662.
14. Tsekos C., Tandurella S., de Jong W. Estimation of lignocellulosic biomass pyrolysis product yields using artificial neural networks. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2021, vol. 157, p. 105180, DOI: 10.1016/j.jaap.2021.105180.
15. Dong Z., Bai X., Xu D. et al. Machine learning prediction of pyrolytic products of lignocellulosic biomass based on physicochemical characteristics and pyrolysis conditions. *Bioresource Technology*, 2023, vol. 367, p. 128182, DOI: 10.1016/j.biortech.2022.128182.
16. Biomass-pyrolysis-data. GitHub repository. Available at: <https://github.com/dazhaxie666/Biomass-pyrolysis-data> (accessed: 07/01/2025).
17. Shen J., Yan M., Fang M. et al. Machine learning-based modeling approaches for estimating pyrolysis products of varied biomass and operating conditions. *Bioresource Technology Reports*, 2022, vol. 20, p. 101285, DOI: 10.1016/j.biteb.2022.101285.
18. Simultaneous Thermal Analyzer – STA 449 F5 Jupiter. Analyzing & Testing, NETZSCH-Gerätebau GmbH. Available at: https://analyzing-testing.netzsch.com/_Resources/Persistent/e/7/9/6/e796f7361432facdefd82d616296d644353ace37/STA_449_F5_Jupiter_en_web.pdf (accessed: 07/13/2025).
19. Krishnan S.R., Seelamantula C.S. On the selection of optimum Savitzky-Golay filters. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2013, vol. 61, no. 2, pp. 380–391, DOI: 10.1109/tsp.2012.2225055.
20. Zhao Y., Qian Y., Zhong G. et al. A thermal characteristics study of typical industrial oil based on thermogravimetric-differential scanning calorimetry (TG-DSC). *Fire*, 2024, vol. 7, no. 11, p. 401, DOI: 10.3390/fire7110401.
21. Angelov R. Application of Simpson’s rule in mathematics education for finding the volume of solids of revolution and polyhedra. *Mathematics, Computer Science and Education*, 2024, vol. 7, no. 1, pp. 29–35, DOI: 10.54664/mgnw7160.
22. Părpăriță E., Brebu M., Azhar Uddin M. et al. Pyrolysis behaviors of various biomasses. *Polymer Degradation and Stability*, 2014, vol. 100, pp. 1–9, DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2014.01.005.

Бачурин Роман Михайлович. Аспирант Школы компьютерных наук Тюменского Государственного университета. AuthorID: 1255165, SPIN: 6112–8862, ORCID: 0009-0001-2177-3024, romanbachurin@gmail.com, 625003, Россия, г. Тюмень, ул. Республики, 9.

Захарова Ирина Гелиевна. Кандидат физико-математических наук, профессор, профессор Школы компьютерных наук Тюменского Государственного университета. AuthorID: 197039, SPIN: 9354–2462, ORCID: 0000-0002-4211-7675, i.g.zakharova@utmn.ru, 625003, Россия, г. Тюмень, ул. Республики, 9.

UDC 004.89

DOI:10.25729/ESI.2026.41.1.004

Intelligent data analysis system for the biomass pyrolysis process

Roman M. Bachurin, Irina G. Zakharova

University of Tyumen, Russia, Tyumen, romanbachurin@gmail.com

Abstract. The article presents the results of a study aimed at the development and software implementation of methods for mathematical modeling of the plant biomass pyrolysis process. The main objective of the study is to create an intelligent system for analyzing experimental data, which allows us to study the technological parameters of the pyrolysis process. The key components of the developed system include a set of machine learning models (model quality metrics values $RMSE < 3.9$, $R^2 > 0.8$) for predicting the yield of final pyrolysis products; tools for analyzing differential scanning calorimetry (DSC) curves and assessing the thermal effect of reactions; a

subsystem for identifying and visualizing thermogravimetric (TGA) and DSC curves. The predictive models were trained on a sample (750 records) compiled from open datasets on full-scale experiments on the pyrolysis of plant raw materials. The target variables were the percentage content of solids, liquids, and gases in the final pyrolysis products. Independent variables included the physicochemical characteristics of feedstock and the parameters of the pyrolysis process. The practical significance of this study lies in its potential for a deeper understanding of biomass decomposition processes. The developed system provides researchers and technologists with comprehensive tools for analyzing and identifying DSC curves, facilitating the interpretation of experimental data. The scientific novelty of this work lies in the creation of a unified research support platform based on the integration of machine learning methods with traditional approaches to pyrolysis process analysis. This significantly improves forecasting accuracy and optimizes the pyrolysis process for obtaining end products. The results of this study can be applied in research in the field of thermochemical processes, applied bioenergy, the chemical industry, and other areas related to biomass processing by pyrolysis. Future development of the system involves expanding the DSC curve database, improving machine learning algorithms, and integrating additional experimental data analysis methods for a detailed interpretation of the pyrolysis process, taking into account its dynamics.

Keywords: biomass pyrolysis, mathematical modeling, machine learning, neural networks, differential scanning calorimetry

Acknowledgements: This study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project FEWZ-2024-0052.

References

1. Ogunsola, N.O., Oh, S.S., Jeon, P.R., et al. Progresses and challenges of machine learning approaches in thermochemical processes for bioenergy: a review. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2024, vol. 41, no. 7, pp. 1923–1953, DOI: 10.1007/s11814-024-00181-7.
2. Khan M., Raza Naqvi S., Ullah Z. et al. Applications of machine learning in thermochemical conversion of biomass - a review. *Fuel*, 2023, vol. 332, p. 126055, DOI: 10.1016/j.fuel.2022.126055.
3. Fahmy T.Y.A., Fahmy Y., Mobarak F. et al. Biomass pyrolysis: past, present, and future. *Environment, Development and Sustainability*, 2018, vol. 22, no. 1, pp. 17–32, DOI: 10.1007/s10668-018-0200-5.
4. Chen Q., Yang R., Zhao B. et al. Investigation of heat of biomass pyrolysis and secondary reactions by simultaneous thermogravimetry and differential scanning calorimetry. *Fuel*, 2014, vol. 134, pp. 467–476, DOI: 10.1016/j.fuel.2014.05.092.
5. Călin C., Sîrbu E.-E., Tănase M. et al. Thermogravimetric analysis of biomass conversion to biochar: experimental and kinetic modeling. *Applied Sciences*, 2024, vol. 14, no. 21, p. 9856, DOI: 10.3390/app14219856.
6. Ameh V.I., Ayeleru O.O., Nomngongo P.N. et al. Bio-oil production from waste plant seeds biomass as pyrolytic lignocellulosic feedstock and its improvement for energy potential: a review. *Waste Management Bulletin*, 2024, vol. 2, no. 2, pp. 32–48, DOI: 10.1016/j.wmb.2024.03.002.
7. Díaz I., Rodríguez M., Arnaiz C. et al. Biomass pyrolysis kinetics through thermogravimetric analysis. In *Computer Aided Chemical Engineering*, 2013, pp. 1–6, DOI: 10.1016/b978-0-444-63234-0.50001-4.
8. Badenko V.V., Kozlov A.N., Penzik M.V. Validatsiya CFD-modeli reaktora piroliza s ispol'zovaniyem dannykh termogravimetricheskogo analiza i mass-spektrometrii [Validation of a pyrolysis reactor CFD model using thermogravimetric analysis and mass spectrometry data]. *Informatsionnyye i matematicheskiye tekhnologii v nauke i upravlenii* [Information and Mathematical Technologies in Science and Management], 2025, vol. 38, no. 2, pp. 90-102, DOI: 10.25729/ESI.2025.38.2.008.
9. Badenko V., Sosnovsky I., Kozlov A. et al. Kinetic and quantitative analysis of gaseous products of thermochemical biomass conversion based on thermogravimetric and mass-spectrometric data. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 2024, vol. 18, no. 5, pp. 1254-1266, DOI: 10.1002/bbb.2616.
10. Akinpelu D.A., Adekoya O.A., Oladoye P.O. et al. Machine learning applications in biomass pyrolysis: from biorefinery to end-of-life product management. *Digital Chemical Engineering*, 2023, vol. 8, p. 100103, DOI: 10.1016/j.dche.2023.100103.
11. Chen Q., Xue P., Yang Z. et al. Machine learning for product distribution prediction of one-step pyrolysis model of coal. *Journal of the Energy Institute*, 2025, vol. 121, p. 102152, DOI: 10.1016/j.joei.2025.102152.
12. Rahimi M., Mashhadimoslem H., Vo Thanh H. et al. Yield prediction and optimization of biomass-based products by multi-machine learning schemes: neural, regression and function-based techniques. *Energy*, 2023, vol. 283, p. 128546, DOI: 10.1016/j.energy.2023.128546.
13. Balsora H.K., S K., Joshi J.B. et al. Artificial neural network-based models for the prediction of biomass pyrolysis products from preliminary analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, vol. 62, no. 37, pp. 14934-14943, DOI: 10.1021/acs.iecr.3c01662.

14. Tsekos C., Tandurella S., de Jong W. Estimation of lignocellulosic biomass pyrolysis product yields using artificial neural networks. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2021, vol. 157, p. 105180, DOI: 10.1016/j.jaap.2021.105180.
15. Dong Z., Bai X., Xu D. et al. Machine learning prediction of pyrolytic products of lignocellulosic biomass based on physicochemical characteristics and pyrolysis conditions. *Bioresource Technology*, 2023, vol. 367, p. 128182, DOI: 10.1016/j.biortech.2022.128182.
16. Biomass-pyrolysis-data. GitHub repository. Available at: <https://github.com/dazhaxie666/Biomass-pyrolysis-data> (accessed: 07/01/2025).
17. Shen J., Yan M., Fang M. et al. Machine learning-based modeling approaches for estimating pyrolysis products of varied biomass and operating conditions. *Bioresource Technology Reports*, 2022, vol. 20, p. 101285, DOI: 10.1016/j.biteb.2022.101285.
18. Simultaneous Thermal Analyzer – STA 449 F5 Jupiter. Analyzing & Testing, NETZSCH-Gerätebau GmbH. Available at: https://analyzing-testing.netzsch.com/_Resources/Persistent/e/7/9/6/e796f7361432facdefd82d616296d644353ace37/STA_449_F5_Jupiter_en_web.pdf (accessed: 07/13/2025).
19. Krishnan S.R., Seelamantula C.S. On the selection of optimum Savitzky-Golay filters. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2013, vol. 61, no. 2, pp. 380–391, DOI: 10.1109/tsp.2012.2225055.
20. Zhao Y., Qian Y., Zhong G. et al. A thermal characteristics study of typical industrial oil based on thermogravimetric-differential scanning calorimetry (TG-DSC). *Fire*, 2024, vol. 7, no. 11, p. 401, DOI: 10.3390/fire7110401.
21. Angelov R. Application of Simpson’s rule in mathematics education for finding the volume of solids of revolution and polyhedra. *Mathematics, Computer Science and Education*, 2024, vol. 7, no. 1, pp. 29–35, DOI: 10.54664/mgnw7160.
22. Părpăriță E., Brebu M., Azhar Uddin M. et al. Pyrolysis behaviors of various biomasses. *Polymer Degradation and Stability*, 2014, vol. 100, pp. 1–9, DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2014.01.005.

Bachurin Roman Mikhailovich. Postgraduate student at the School of Computer Sciences at the University of Tyumen. AuthorID: 1255165, SPIN: 6112-8862, ORCID: 0009-0001-2177-3024, romanbachurin@gmail.com, 625003, Russia, Tyumen, Respubliki St., 9.

Zakharova Irina Gelievna. Professor (PhD) at the School of Computer Sciences at the University of Tyumen. AuthorID: 197039, SPIN: 9354-2462, ORCID: 0000-0002-4211-7675, i.g.zakharova@utmn.ru, 625003, Russia, Tyumen, Respubliki St., 9.

Статья поступила в редакцию 29.09.2025; одобрена после рецензирования 15.02.2026; принята к публикации 16.02.2026.

The article was submitted 09/29/2025; approved after reviewing 02/15/2026; accepted for publication 02/16/2026.