



HAL
open science

Modélisation des espèces volatiles produites lors de la torréfaction de la biomasse par apprentissage automatique

Jean-Louis Dirion, María González Martínez, Marion Beaufort, Marin Gallego
Mylène, Xuân-Mi Meyer

► **To cite this version:**

Jean-Louis Dirion, María González Martínez, Marion Beaufort, Marin Gallego Mylène, Xuân-Mi Meyer. Modélisation des espèces volatiles produites lors de la torréfaction de la biomasse par apprentissage automatique. SFGP 2022 - 18ème Congrès de la Société Française de Génie des Procédés, Nov 2022, Toulouse, France. ⟨hal-04855268⟩

HAL Id: hal-04855268

<https://imt-mines-albi.hal.science/hal-04855268v1>

Submitted on 24 Dec 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Modélisation des espèces volatiles produites lors de la torréfaction de la biomasse par apprentissage automatique

Jean-Louis DIRION¹, Maria GONZALEZ MARTINEZ¹, Marion BEAUFORT¹,
Mylène MARIN-GALLEGO², Xuan MEYER²

Affiliation 1 : Centre RAPSODEE, Université de Toulouse, Mines Albi, CNRS UMR 5302, Albi, France.

Affiliation 2 : Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, Toulouse, France.

Introduction et objectifs

La torréfaction est un traitement thermique sous une atmosphère pauvre en oxygène, adapté à la biomasse sèche. Les produits obtenus sont un solide torréfié et des espèces gazeuses : gaz permanents, espèces volatiles et eau. Certaines espèces volatiles peuvent être récupérées comme source de produits à haute valeur ajoutée. Il reste cependant difficile de récupérer les espèces volatiles en raison de leur production hétérogène selon la nature de la biomasse et le niveau de température. Une première tentative de modélisation par une approche additive, où les fractions extraites sont pondérées selon la composition macromoléculaire de la biomasse brute, a été réalisée récemment (González Martínez, 2022). Le travail présenté ici s'inscrit dans la continuité pour développer un modèle prédictif de production des principales espèces volatiles libérées lors de la torréfaction selon une approche statistique basée uniquement sur les données expérimentales.

Matériels et méthodes

Les données de cette étude sont basées sur 20 biomasses ligno-cellulosiques, incluant des bois, des cultures herbacées et des sous-produits agricoles. Chacune a été caractérisée par ses fractions extraites de cellulose, hémicellulose et lignine, par ses proportions en sucres (glucan, xylan, mannan, galactan et arabinan), ainsi que sa proportion en acétates (González Martínez, 2018, 2019). La torréfaction a été réalisée en thermobalance couplée à un analyseur GC/MS via un système de boucle de stockage chauffée. Ce couplage original permet d'étudier simultanément la cinétique du solide et la libération des espèces volatiles entre 200 et 300°C avec une rampe de température de 3°C.min⁻¹. Ces conditions expérimentales permettent de faire l'hypothèse d'un régime contrôlé par la cinétique chimique. L'analyse des gaz a permis de quantifier 23 espèces volatiles dont la production instantanée, exprimée par la suite en masse de volatiles produits divisée par la masse de biomasse torréfiée, a été mesurée tous les 10°C, soit 11 mesures par biomasse. Les résultats présentés ici se focalisent sur la prédiction de la production d'acide acétique lors de la torréfaction de biomasses.

Le traitement des données ainsi que les différents modèles obtenus par apprentissage automatique ont été réalisés avec la *Machine Learning and Statistical Toolbox* de MATLAB. La méthodologie a consisté à déterminer quelle métrique, quelles stratégies et démarche, et quel algorithme d'apprentissage permettraient d'obtenir un modèle avec les meilleures capacités prédictives.

Résultats

Les quantités d'acide acétique produites peuvent fortement varier selon la biomasse et le niveau de température, c'est la raison pour laquelle la métrique définie pour évaluer les capacités prédictives du modèle a été l'erreur moyenne absolue en pourcentage (MAE) :

$$MAE\% = \frac{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |y_i - \hat{y}_i|}{\bar{y}}$$

y_i , \hat{y}_i , \hat{y}_i représentent respectivement la production d'acide acétique en g(espèce volatile)/g(biomasse transformée), la valeur prédite et la valeur moyenne pour la biomasse considérée.

La stratégie d'apprentissage retenue a consisté à réaliser l'apprentissage sur 19 biomasses et d'évaluer les performances du modèle sur la 20^{ème} biomasse. L'apprentissage a été basé sur une validation croisée organisée en 6 blocs de données. De nombreux essais ont permis de d'optimiser les données (standardisées préalablement) à fournir au modèle : la température, la proportion de mannose (fortement corrélées avec les groupes de biomasse), les proportions de cellulose, d'hémicellulose, et de lignine et la famille d'appartenance de la biomasse, qui a correspondu :

- soit aux 5 familles des biomasses étudiées : feuillu, conifère, sous-produit agricole, culture herbacée, fougère ;
- soit à des familles obtenues par partitionnement (ou *clustering*) hiérarchique grâce à la méthode des K-moyennes ; le nombre optimal de famille fut de 3.

Plusieurs algorithmes d'apprentissage ont été utilisés. Les résultats obtenus par régression par processus gaussien (GPR), par arbre de régression (*Tree*) et par *Support Vector Regression* (SVR) sont donnés dans la Table 1. Les performances prédictives (MAE%) pour chacune des biomasses sont indiquées selon l'algorithme employé (Tree/SVR/GPR). Les couleurs correspondent aux 3 familles obtenues par clustering. A gauche les performances font référence à un modèle unique, alors qu'à droite elles correspondent à un modèle différent généré pour chaque groupe de biomasses.

| Biom | CHL & Mannose | | | | | |
|---------------------|---------------|------|------|----------|-----|-----|
| | Total | | | By group | | |
| | Tree | SVM | GPR | Tree | SVM | GPR |
| Ash Wood | 10% | 22% | 18% | 13% | 13% | 12% |
| Beech | 19% | 45% | 41% | 20% | 36% | 35% |
| Poplar | 12% | 7% | 29% | 11% | 12% | 31% |
| Reed Canary Grass | 50% | 27% | 27% | 50% | 30% | 30% |
| Sunflower Shells | 25% | 35% | 37% | 17% | 31% | 34% |
| Willow | 21% | 16% | 27% | 30% | 17% | 28% |
| Fern | 29% | 44% | 27% | 33% | 23% | 24% |
| Grape Seed Cake | 45% | 37% | 37% | 59% | 51% | 50% |
| Pine | 125% | 152% | 140% | 54% | 59% | 69% |
| Pine Forest Residu | 22% | 39% | 27% | 25% | 26% | 25% |
| Scot Pine Bark | 138% | 133% | 135% | 73% | 40% | 49% |
| Corn cob | 26% | 39% | 41% | 34% | 44% | 46% |
| French Wheat Straw | 49% | 17% | 28% | 45% | 15% | 23% |
| Gorse | 15% | 31% | 29% | 14% | 32% | 20% |
| Heather | 35% | 31% | 31% | 33% | 31% | 28% |
| Miscanthus | 32% | 10% | 33% | 30% | 11% | 26% |
| Oak | 24% | 51% | 51% | 26% | 45% | 34% |
| Swedish Wheat Straw | 12% | 8% | 8% | 13% | 10% | 8% |
| White Broom | 10% | 29% | 28% | 13% | 26% | 6% |
| Yellow Broom | 56% | 23% | 19% | 59% | 24% | 23% |
| Mean | 38% | 40% | 41% | 33% | 29% | 30% |

Table 1 : Capacités prédictives des différents modèles obtenus pour les 20 biomasses d'étude

Ces premiers résultats sont encourageants malgré un « petit » dataset. Il reste à comprendre pourquoi certaines biomasses, comme le pin, sont moins bien représentées.

Références bibliographiques

González Martínez, M., Dupont, C., Thiéry, S., Meyer, X.-M., Gourdon, C., 2018. Impact of biomass diversity on torrefaction: Study of solid conversion and volatile species formation through an innovative TGA-GC/MS apparatus. *Biomass Bioenergy* 119, 43–53.

González Martínez, M., Dupont, C., da Silva Perez, D., Míguez-Rodríguez, L., Grateau, M., Thiéry, S., Tamminen, T., Meyer, X.-M., Gourdon, C., 2019. Assessing the suitability of recovering shrub biowaste involved in wildland fires in the South of Europe through torrefaction mobile units. *J. Environ. Manage.* 236, 551–560.

González Martínez, M.; Dirion, J.-L.; Beaufort, M.; Anca-Couce, A.; Marin-Gallego, M.; Meyer, X.-M. Experimental and modelling study of volatile species released in biomass torrefaction based on extracted cellulose, hemicelluloses and lignin, 9th WasteEng Int. Conf., Copenhagen, June 2022.