



**INSTYTUT CHEMICZNEJ  
PRZERÓBKI WĘGLA**



**Metody chemometryczne dla potrzeb  
monitorowania alternatywnych biopaliw stałych,  
procesów ich wytwarzania oraz w poszukiwaniu  
potencjalnych markerów**

Marcin Sajdak

# Agenda

---



Słowo wstępu



Narzędzia



Zakres zainteresowań naukowych



Metoda postępowania



Wyzwania



Osiągnięcie naukowe



Tezy badawcze



Podstawa osiągnięcia naukowego



Metody badawcze



Dane parametryczne



# Słowo wstępu

---

## Wyszktałcenie

**2005 – 2010** – Politechnika Śląska w Gliwicach, Wydział Chemiczny, Kierunek studiów: Technologia chemiczna  
Specjalność: Analityka w kontroli jakości i ochronie środowiska



**2010 – 2011** – Politechnika Radomska w Radomiu, Kierunek studiów: Walidacja–Systemy i laboratoria pomiarowe



**2010 – 2011** – Politechnika Śląska w Gliwicach, Wydział Chemiczny, Kierunek studiów: Technologia chemiczna, Specjalność: Technologia polimerów i tworzyw sztucznych



**2013 – 2014** – Politechnika Śląska w Gliwicach, Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki, Kierunek studiów: Inżynieria Środowiska, Dziedzina naukowa: Nauki techniczne, Dyscyplina naukowa: Inżynieria środowiska, Specjalność naukowa: Chemometria



# Słowo wstępu

---

## Doświadczenie zawodowe

**2011 – obecnie** – Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla  
Adiunkt



Kierownik 6 projektów w tym projektów statutowych



Ministerstwo Nauki  
i Szkolnictwa Wyższego



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Główny wykonawca w 4 projektach strategicznych  
i międzynarodowych



Narodowe Centrum  
Badań i Rozwoju



Stypendysta

Stypendium dla wybitnych młodych naukowców 2018

Udział w recenzowaniu ponad 40 artykułów w 20 czasopismach z listy JCR  
oraz recenzji projektu międzynarodowego

# Słowo wstępu

---

## Staż zagraniczne

**2015** – Aston University, European Bioenergy Research Institute, Wielka Brytania

Termochemiczna charakterystyka biomasy i odpadów polimerowych z zastosowaniem: TGA, Py-GC-MS, analizy elementarnej

**2016** – Niigata University, Department of Chemistry and Chemical Engineering, Japonia

Prowadzenie badań z wykorzystaniem technologii CLC Calcium Looping Cycle w wysokotemperaturowym reaktorze fluidalnym

**2018** – Aston University, European Bioenergy Research Institute, Wielka Brytania

Prowadzenie badań procesu upłynniania biomasy w warunkach podwyższonego ciśnienia i temperatury w różnych atmosferach procesowych

# Zakres zainteresowań naukowych

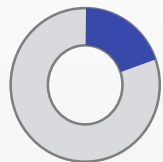
---



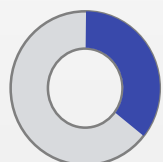
1. Wykorzystanie **metod chemometrycznych** w analizie procesów **termicznej konwersji** paliw stałych i odpadów
2. Wykorzystanie **metod chemometrycznych** w analizie produktów uzyskanych podczas **termicznej konwersji** paliw stałych i odpadów
3. Wykorzystanie **metod chemometrycznych** w analizie **biomasy stałej**
4. Budowa użytecznych narzędzi **klasyfikacyjnych** do badania bio-paliw stałych oraz odpadów paleniskowych

# Wyzwania

---



Klasyfikacja karbonizatu z biomasy na cele energetyczne i jego wykorzystanie jako materiału całkowicie pochodzącego z biomasy



Wykorzystanie analizy spektroskopowej w ocenie stopnia zanieczyszczenia karbonizatów z biomasy materiałami polimerowymi



Ocena pochodzenia termicznie przetworzonych paliw stałych



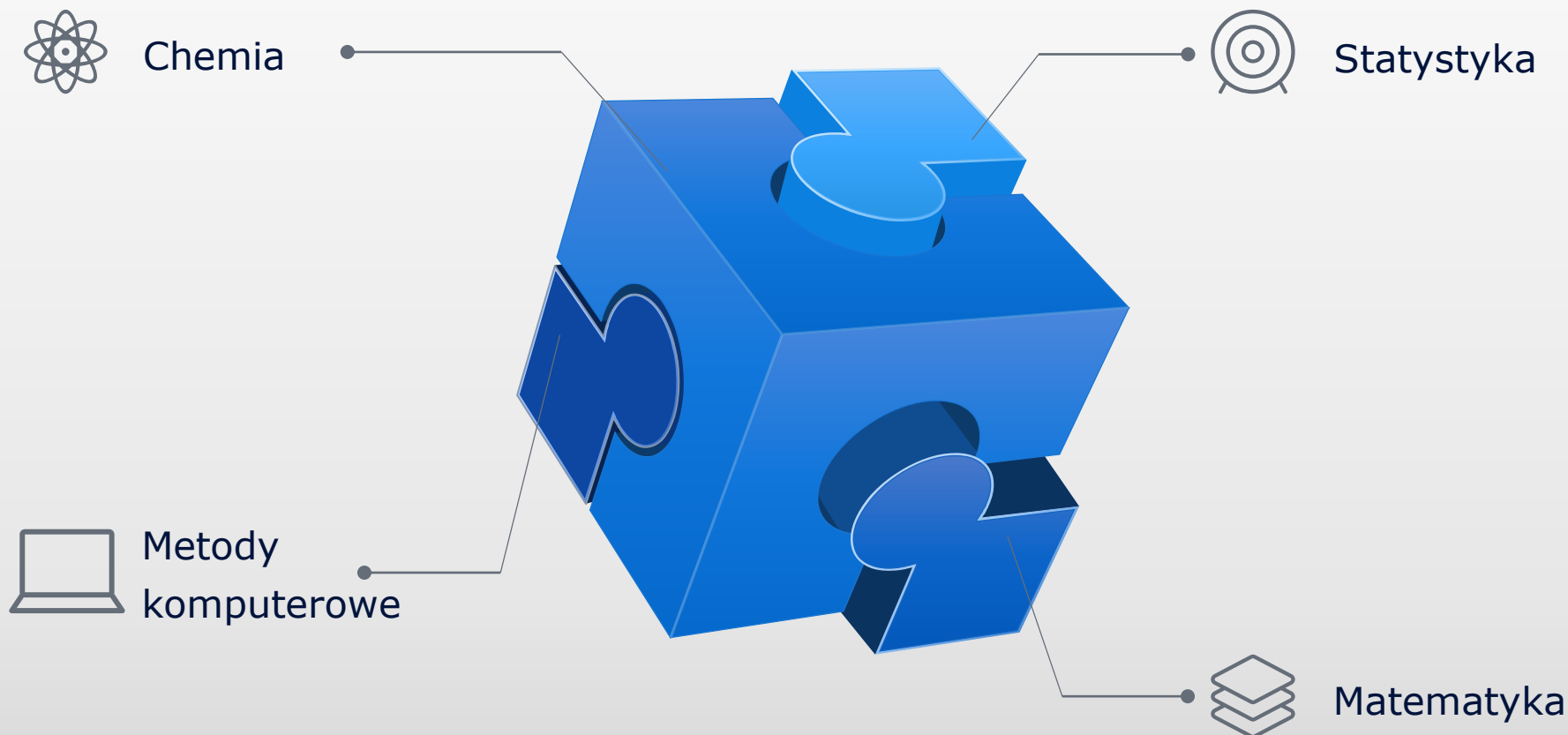
Określenie tożsamości biomasy przeznaczonej na cele energetyczne



Wykrywanie nielegalnie spalanych odpadów w indywidualnych urządzeniach grzewczych

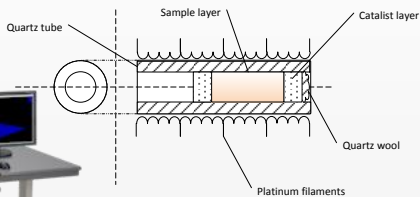
# Metody

---

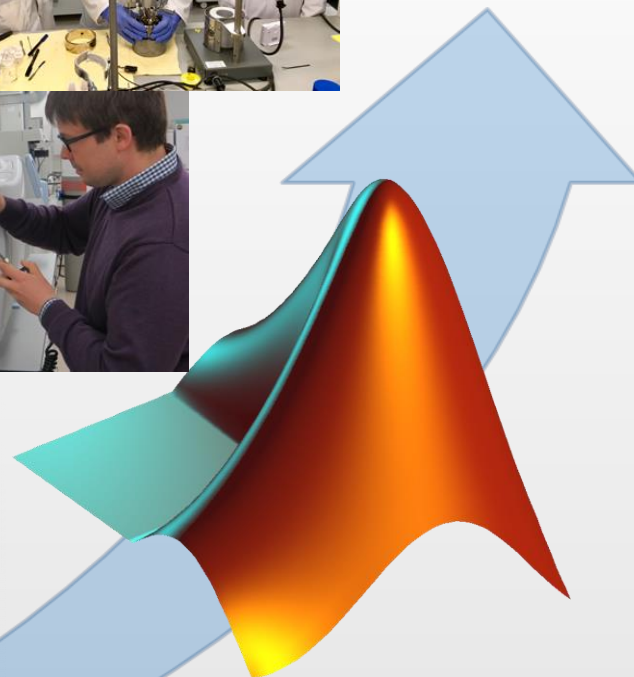
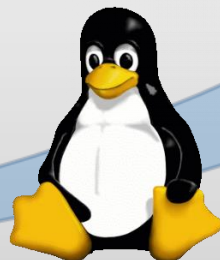
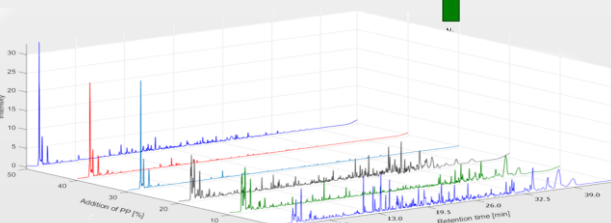
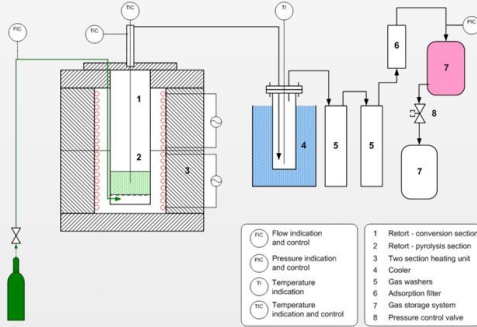




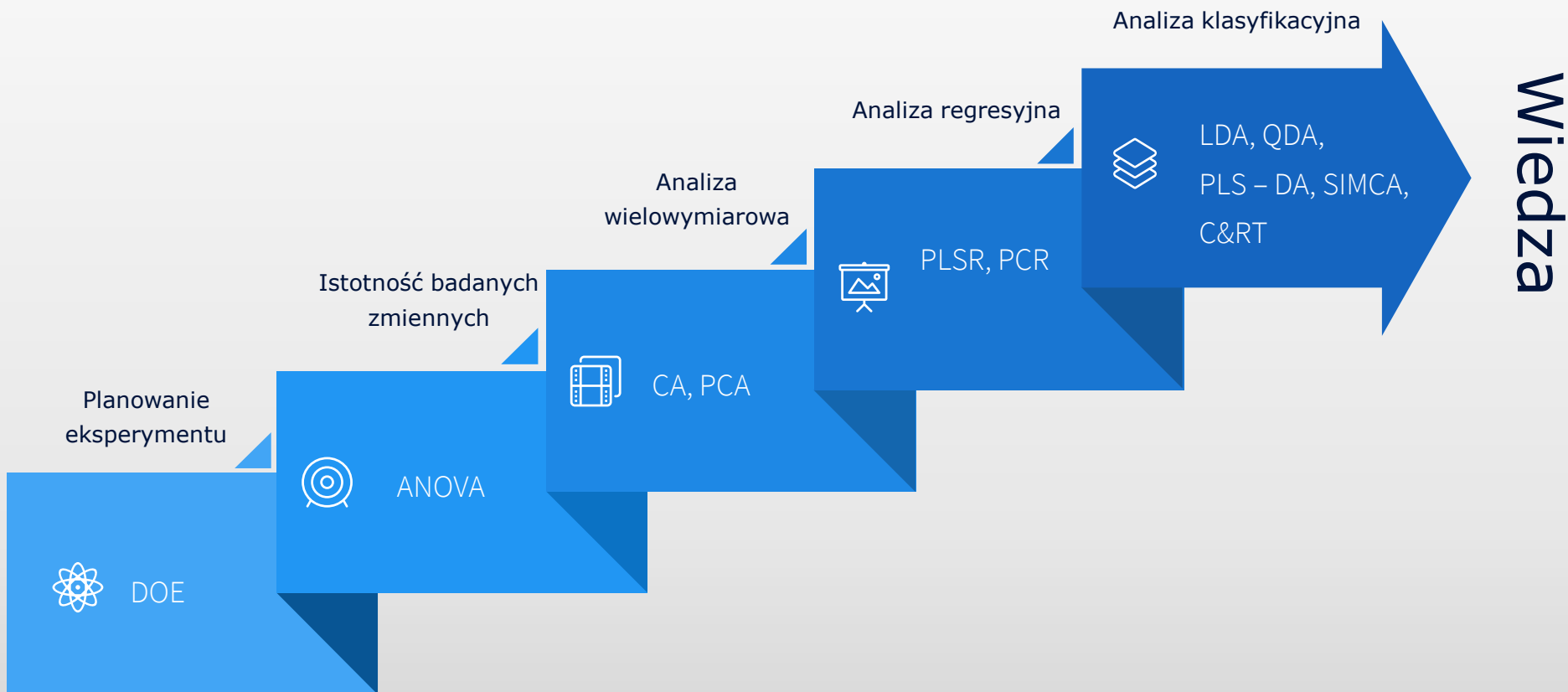
# Narzędzia



SOLID FUELS PYROLYSIS SYSTEM



# Metody



# Hipotezy i cele badawcze

---

Wykorzystanie wielowymiarowej analizy danych umożliwia określenie wpływu tworzyw sztucznych na proces i właściwości produktów termicznej konwersji biomasy

Wykorzystanie wielowymiarowej analizy danych umożliwia wskazanie zmiany grup chemicznych biopaliw stałych II generacji

Metody optymalizacyjne – podniesienie wydajności procesu termicznej konwersji, analizy chemicznej jej produktów oraz możliwości oczyszczania strumieni produktów odpadowych

Sprzężenie metod spektroskopowych z metodami wielowymiarowej analizy danych pozwala na opracowanie wydajnych metod klasyfikacyjnych

# Geneza

---

Przeszkody legislacyjne i prawne

*Toryfikat z biomasy* }  $\neq$  *Biomasa*  
*Karbonizat z biomasy* }

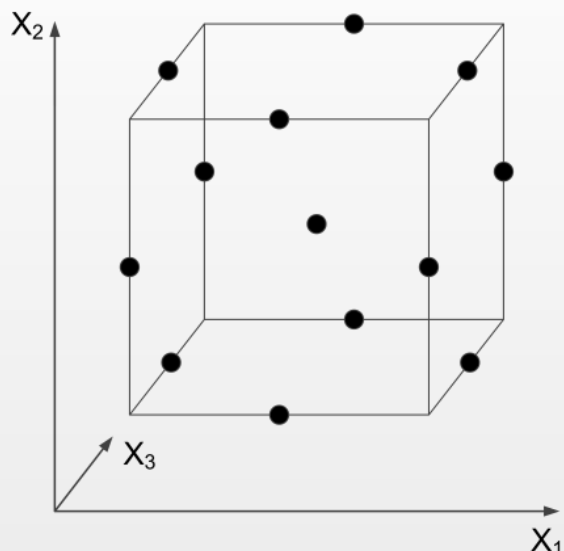
*Nie – biomasa → brak wsparcia do zielonej energii*

Brak dedykowanych rozwiązań i procedur analitycznych

Wykorzystywanie procedur analitycznych i norm przygotowanych do badania stałych paliw wtórnych

Brak dobrze udokumentowanej wiedzy

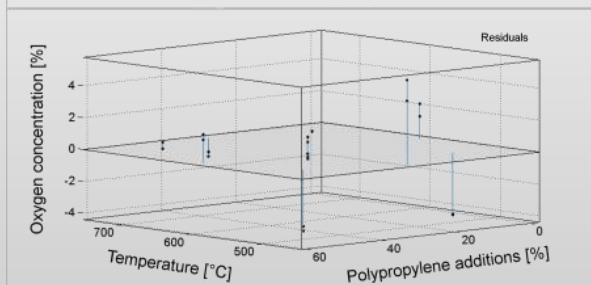
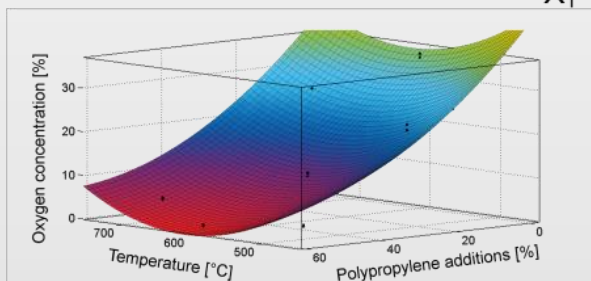
# Działania procesowe



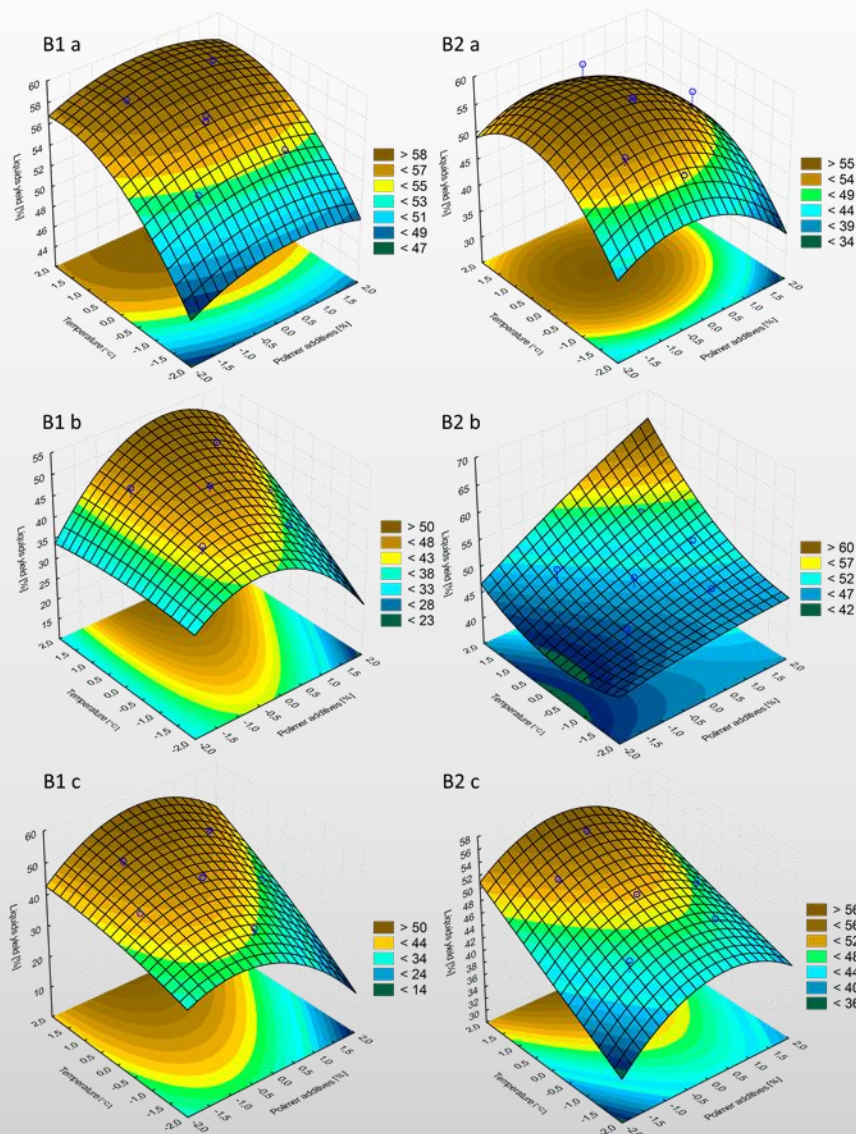
Informacje o statystycznie istotnych zmiennych wpływających na proces wynikają bezpośrednio z wykorzystania planowania eksperymentów już na etapie rozpoczynania badań.

Prawidłowe zaplanowanie eksperymentu pozwala:

- zminimalizować ilość niezbędnych eksperymentów,
- zwiększyć ilość użytecznych informacji uzyskiwanych podczas prowadzenia badań
- wskazać istnienie interakcji pomiędzy zmiennymi
- przeprowadzić optymalizację procesu poprzez określenia lokalnych lub globalnych optimum.



# Działania procesowe



Wykorzystując tą metodę w prosty sposób można przystąpić do wstępnej interpretacji wyników i przeprowadzić ich porównanie.

Dwie serie testów pirolizy biomasy z dodatkiem tworzyw sztucznych

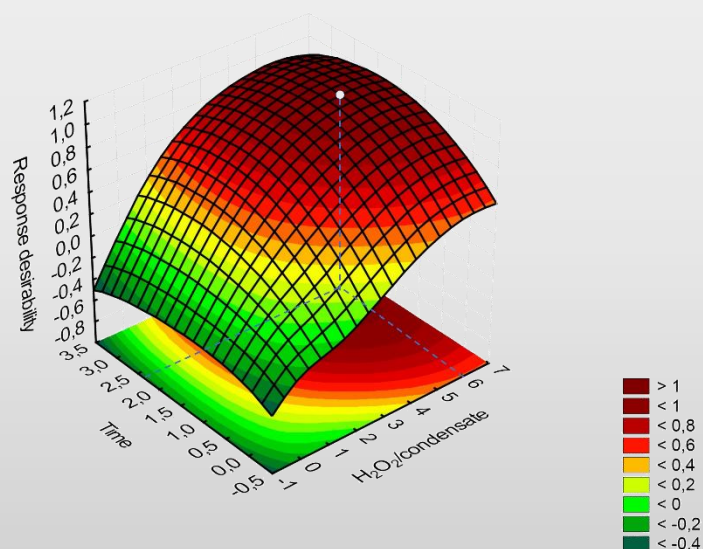
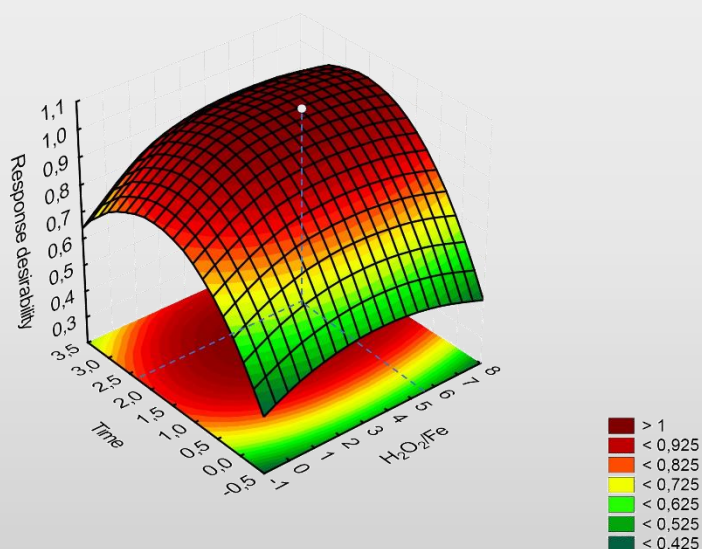
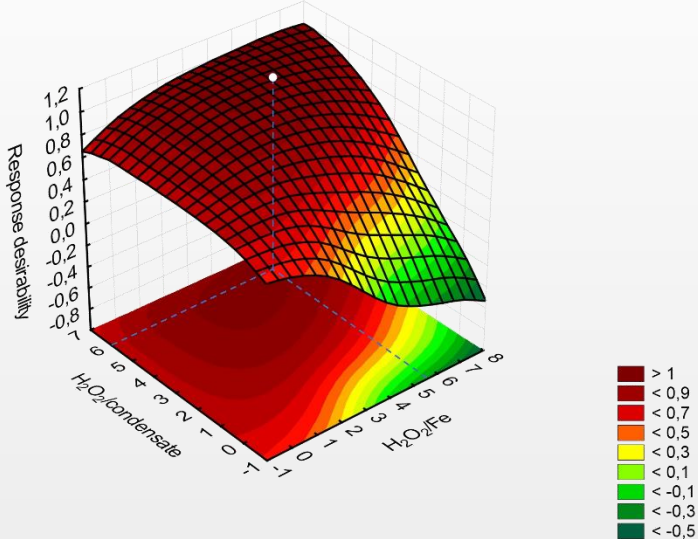
- biomasa drzewna
- słoma zbożowa,
- odpad meblarski

Znacząca zmiana charakterystyki wydajności produktów ciekłych

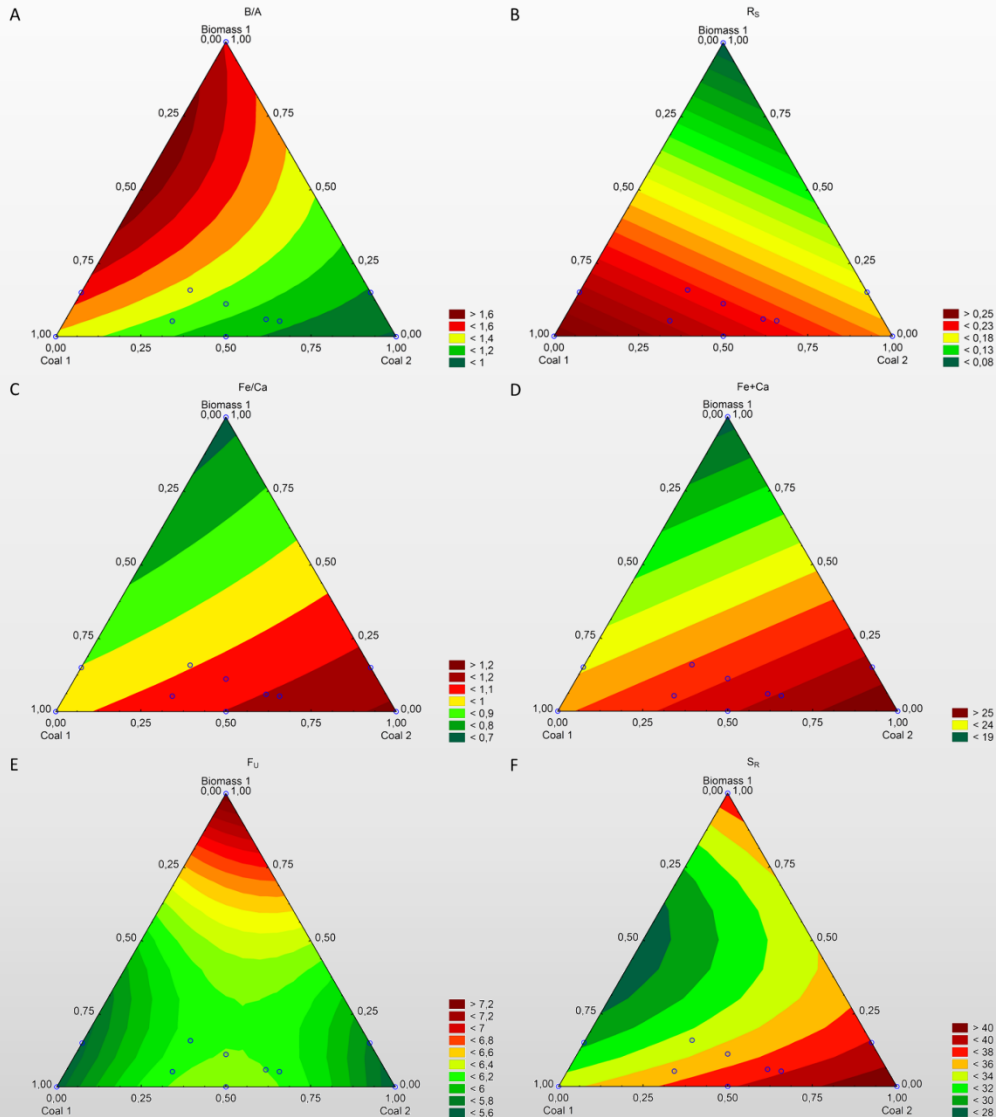
# Działania procesowe

Optymalizacja procesu oczyszczania odpadu po zgazowaniu biomasy

- czas
- $\text{H}_2\text{O}_2/\text{Fe}$
- $\text{H}_2\text{O}_2/\text{kondensat}$



# Działania procesowe

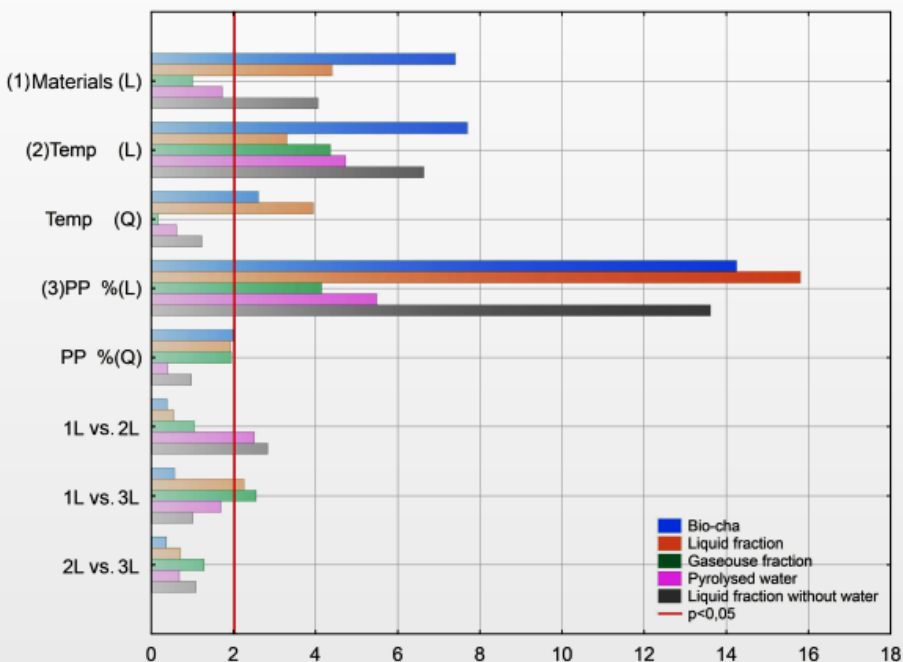


Przeciwdziałanie negatywnym skutkom wykorzystania biomasy w istniejących układach spalanie paliw kopalnych – współspalanie biomasy z węglem.

Optymalizacja stosunku masowego biomasa:węgiel w strumieniu nadawy kotła.

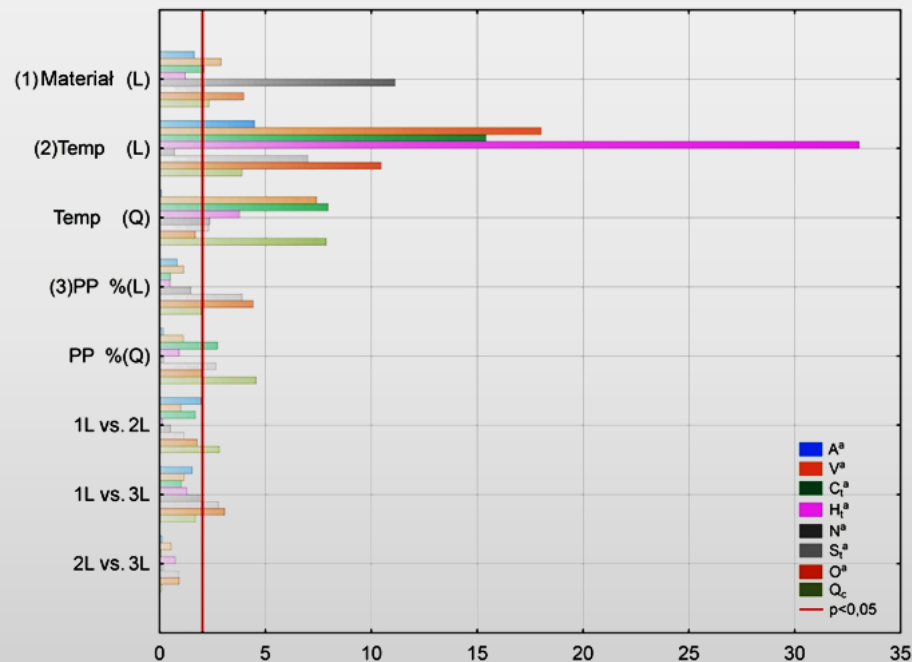


# Wpływ tworzyw sztucznych na pirolizę biomasy

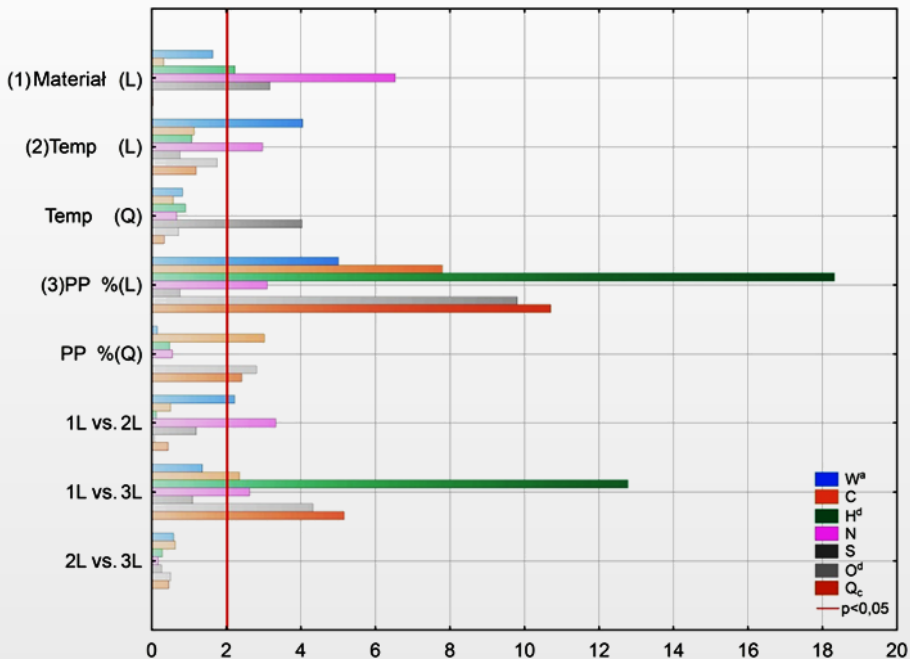


Podczas prowadzonych badań zweryfikowano i potwierdzono wcześniejsze założenia dotyczące wpływu dodatku tworzywa sztucznych do procesu termicznej konwersji biomasy.

Dodatek tworzyw sztucznych ma największy wpływ na proces termicznej konwersji biomasy głównie na wydajność uzyskiwania stałych i ciekłych produktów procesu.

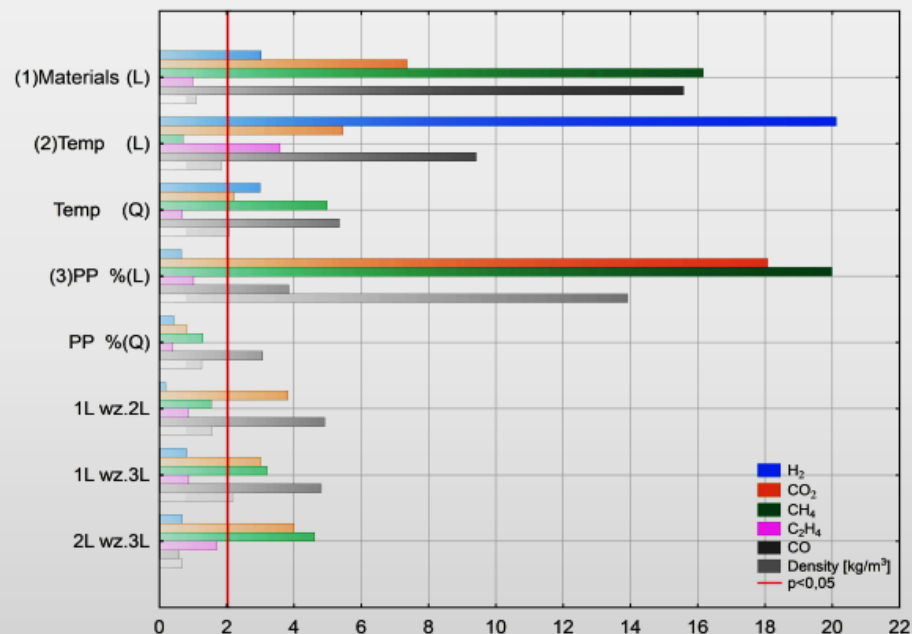


# Wpływ tworzyw sztucznych na pirolizę biomasy

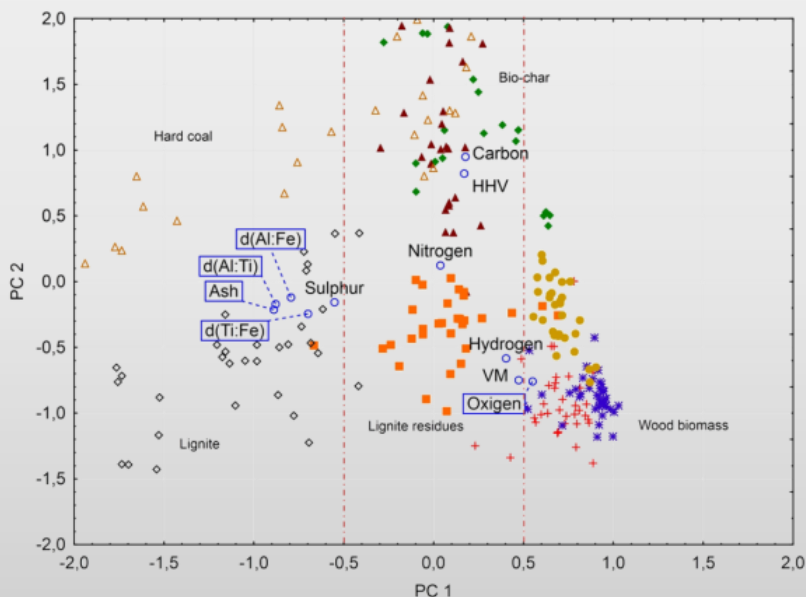
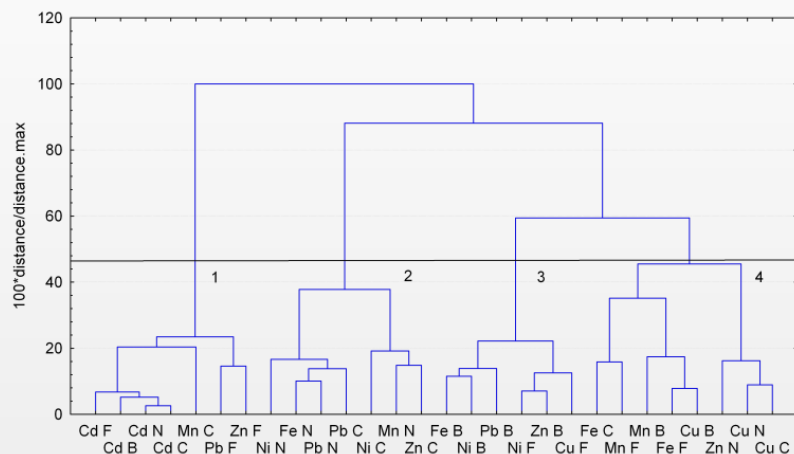


Przeprowadzone badania ukazały dodatkowo istnienie istotnie statystycznych interakcji pomiędzy badanymi zmiennymi – głównie rodzajem biomasy a ilością dodawanego tworzywa sztucznego.

Wpływ dodatku tworzyw sztucznych w zależności od produktu jest zróżnicowany.



# Selekcja markerów



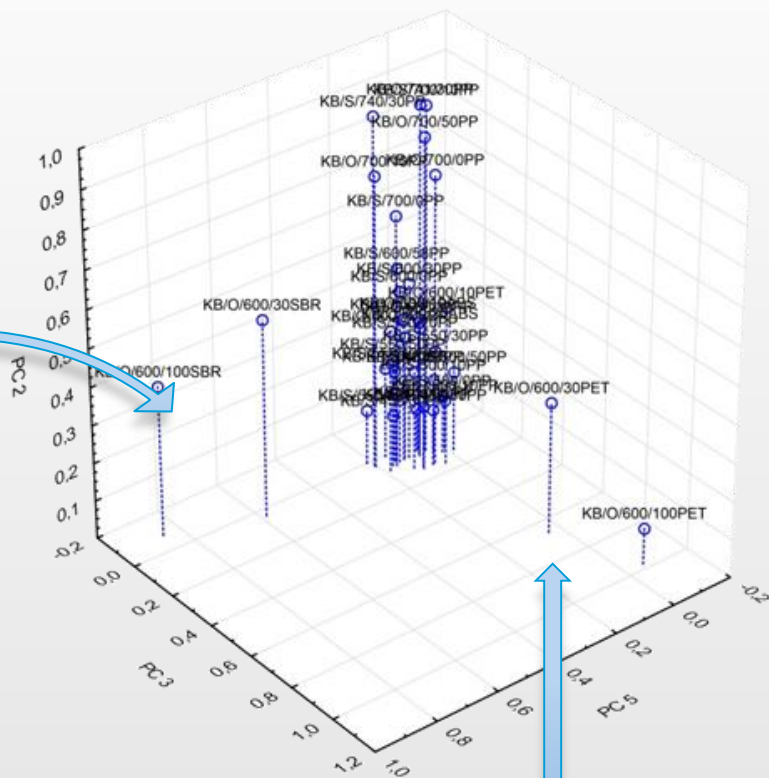
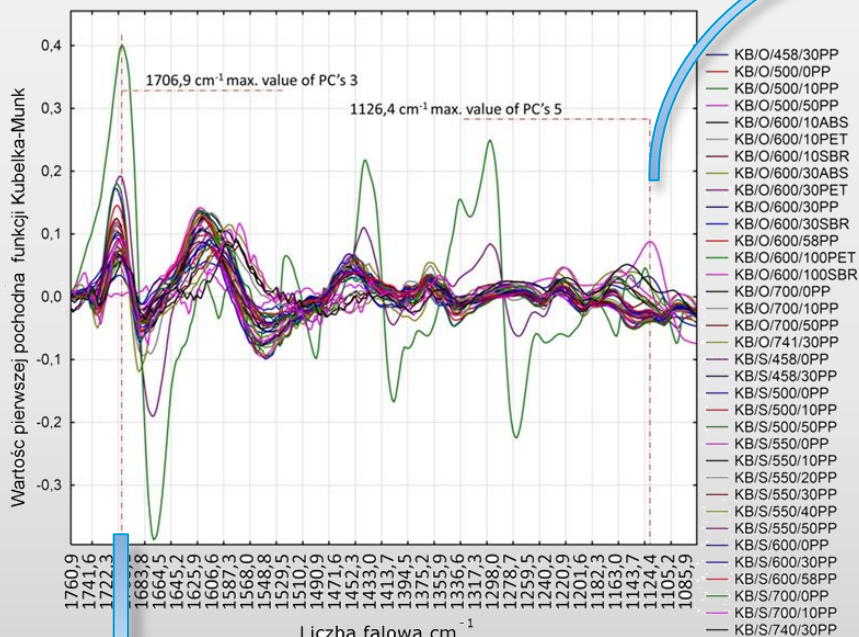
Jak wykorzystać zgromadzoną wiedzę celem wdrożenia lub budowy narzędzi analitycznych?

Wykorzystanie analizy chemometrycznej z następczą interpretacją i selekcją zmiennych

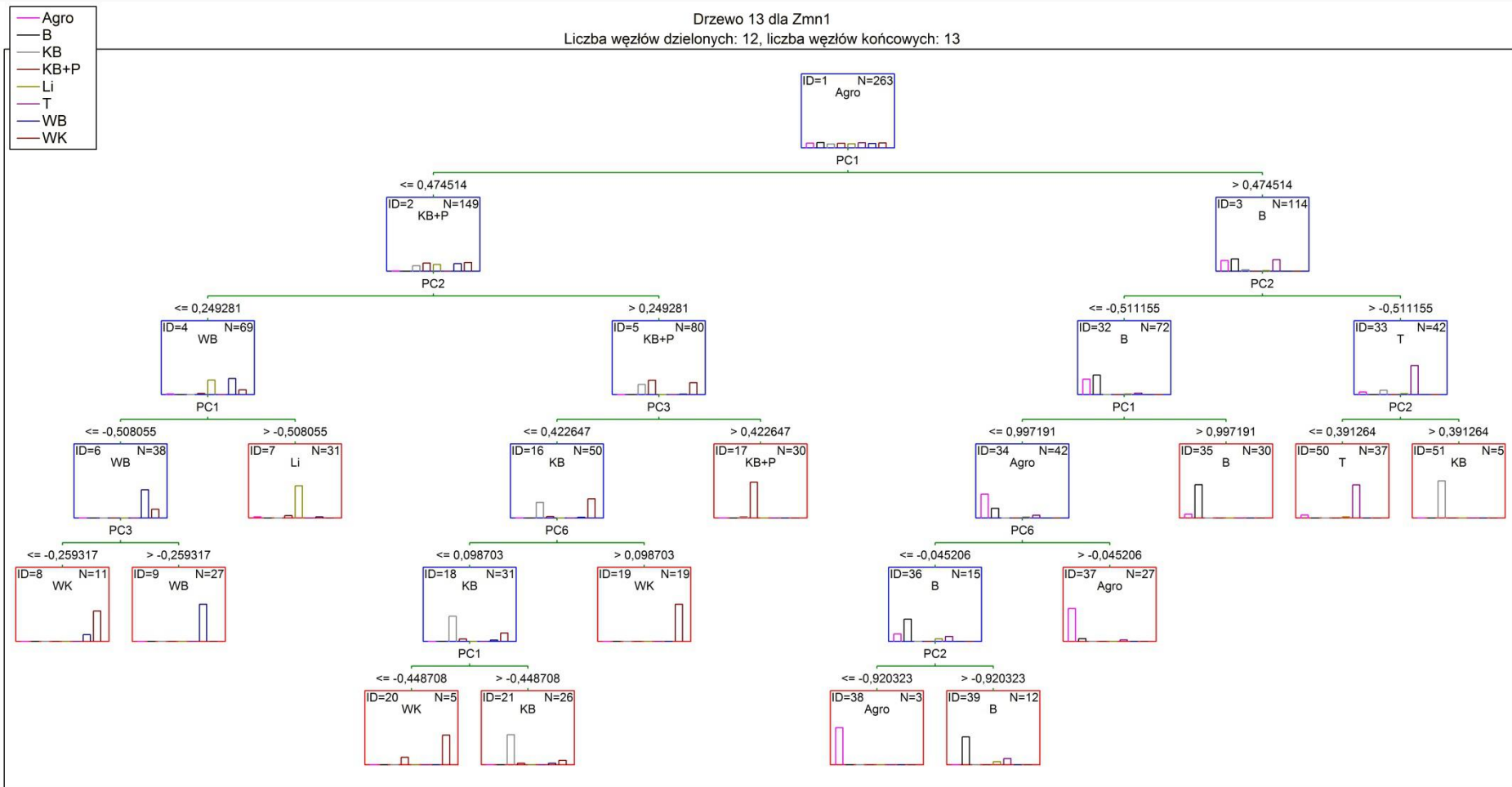
W prowadzonych badaniach wykorzystywano głównie metody klasyfikacyjne zarówno nienadzorowane jak i nadzorowane

# Selekcja markerów

Analiza głównych składowych i jej zastosowanie w wykrywaniu dodatków tworzyw sztucznych do biomasy w procesie termicznej konwersji biomasy



# Budowa nowych procedur badawczych





## Karbonizat z biomasy

Opracowanie i zwalidowanie klasyfikatora umożliwiającego potwierdzenie biomasowego pochodzenia paliw uzyskanych w procesie termicznej konwersji.

Podstawa opracowania - macierz danych wejściowych o populacji **N = 900** należących do 8 typów paliw stałych



**Prawdopodobieństwo klasyfikacji >96%**

# Budowa nowych procedur badawczych

No	Nazwa próbki	Warunki prowadzenia procesu		14C (biomasa Tak/Nie)	BFC (biomasa Tak/Nie)
		Temp.[°C]	Polim. [%]		
1	PL/46/13	500	0	Tak	Tak
2	PL/49/13	700	0	Tak	Tak
3	PL/53/13	600	0	Tak	Tak
4	PL/98/13	458	30PP	<b>Tak</b>	Nie
5	PL/99/13	741	30PP	<b>Tak</b>	Nie
6	PL/102/13	600	30PP	<b>Tak</b>	Nie
7	PL/109/13	600	30SBR	Nie	Nie
8	PL/110/13	600	10SBR	<b>Tak</b>	Nie
9	PL/113/13	600	100SBR	Nie	Nie
10	PL/118/13	600	100PET	Nie	Nie
11	PL/119/13	600	30PET	Nie	Nie
12	PL/120/13	600	10PET	<b>Tak</b>	<b>Tak</b>
13	PL/121/13	600	10ABS	<b>Tak</b>	<b>Tak</b>
14	PL/122/13	600	30ABS	<b>Tak</b>	Nie

SBR – kauczuk styrenowo - butadienowy, PET – poli(tereftalanetulenu), ABS – kopolimer akrylonitryl – butadien – styren, PP – poli(propylen).



## Pochodzenie biomasy

Opracowanie i zwalidowanie klasyfikatora umożliwiającego wskazanie, do której z dwóch grup:

- biomasa drzewna
- biomasa agrarna

należy biomasa kierowana do celów energetycznych.

Podstawa opracowania - macierz danych wejściowych o populacji **N = 500** należących do 2 typów biomasy stałej

**Prawdopodobieństwo klasyfikacji >98%**







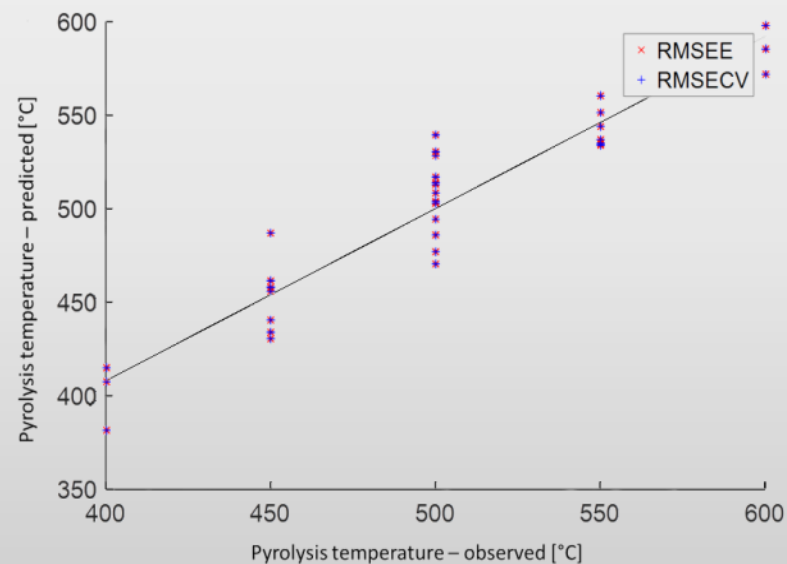
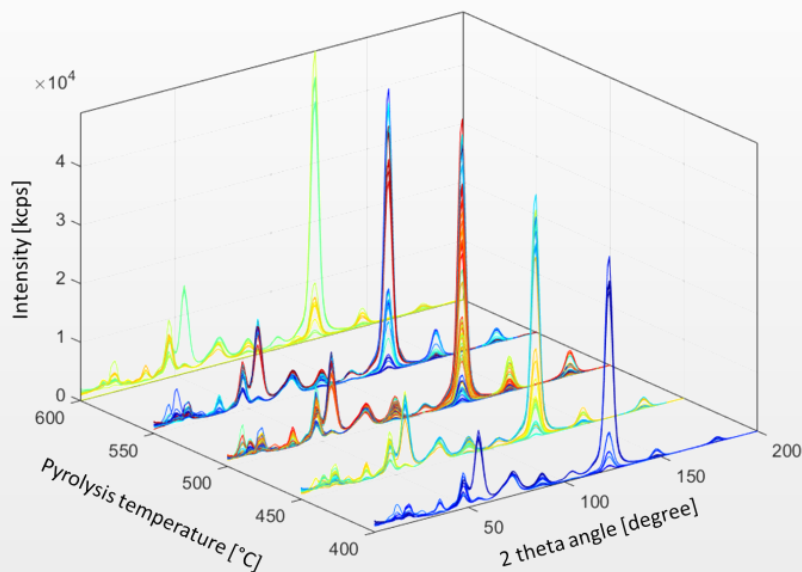
## Jakość bio-paliw stałych

Opracowanie i zwalidowanie klasyfikatorów umożliwiających określenie czystości bio-paliw stałych uzyskanych w procesie termicznej konwersji.

Podstawa opracowania - macierz danych wejściowych - spektroskopowych (XRF, FTIR) populacji **N = 150** należących do 4 typów paliw stałych

**Prawdopodobieństwo klasyfikacji >92%**

# Budowa nowych procedur badawczych



W prowadzonych badaniach oprócz problemów klasyfikacyjnych istotną rolę stanowią mają zagadnienia ilościowe.

Wskazanie wyłącznie informacji jakościowej np. biomasa, odpad, jest niewystarczająca.

Istotnym jest informacja o zawartości zanieczyszczenia w stosunku do dokładności (limitu detekcji) opracowywanych metodyk analitycznych

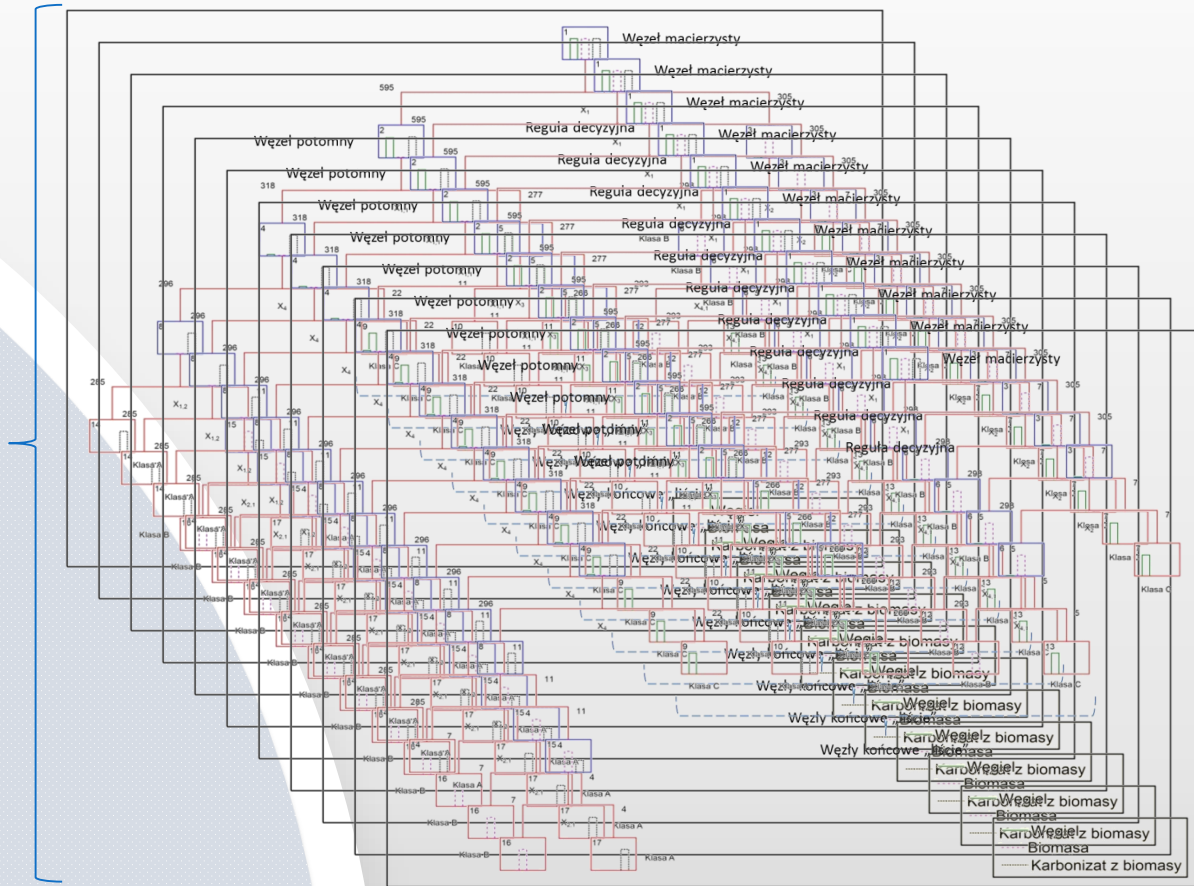
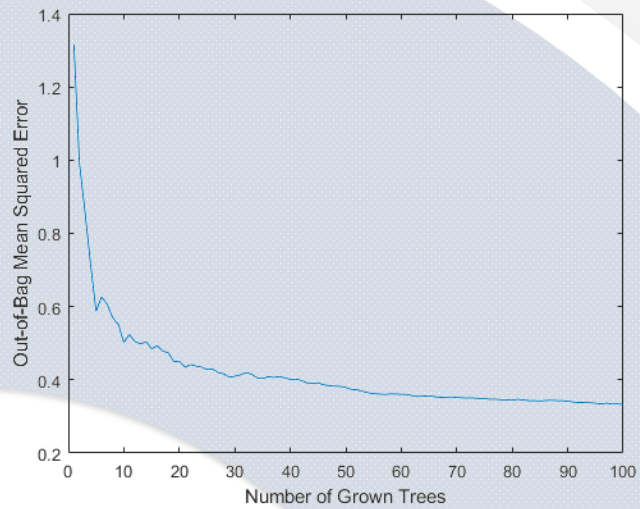
## Wykrywanie spalania odpadów

Opracowanie i zwalidowanie klasyfikatora umożliwiającego określenie czy próbka odpadu paleniskowego pobranego w czasie kontroli indywidualnego urządzenia grzewczego powstała w wyniku spalania lub współspalania odpadów byt-gosp. z paliwami stałymi

Podstawa opracowania - macierz danych wejściowych o populacji **N > 200** należących do 3 typów materiałów

**Prawdopodobieństwo klasyfikacji**

**91-96%**



# Dane parametryczne

Kategoria	Liczba	IF*	M**
<b>Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR)***:</b>			
przed uzyskaniem stopnia doktora	7	12,955	190
po uzyskaniu stopnia doktora	16	48,330	525
wchodzące w skład osiągnięcia naukowego	11	29,427	325
<b>Publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie JCR**:</b>			
przed uzyskaniem stopnia doktora	1	-	-
po uzyskaniu stopnia doktora	0	-	-
<b>Rozdziały w monografiach</b>			
przed uzyskaniem stopnia doktora	4	-	16
po uzyskaniu stopnia doktora	3 (4)	-	12 (16)
<b>SUMA</b>	<b>31 (32)</b>	<b>61,285</b>	<b>743 (747)</b>
<b>Udział w projektach naukowych jako:</b>			
wykonawca/główny wykonawca	4	-	-
kierownik projektu	6	-	-
Kierowanie projektami komercyjnymi	24		
Sumaryczna liczba wystąpień na konferencjach międzynarodowych i krajowych	21	-	-
Sumaryczna liczba cytowań*	96 (193)	-	-
Indeks Hirscha	6 (8)	-	-

---

*„Nauka to zajęcie dla optymistów. Każdy kto stwierdzi, że czegoś nie uda się nam wytłumaczyć, traci tytuł badacza i staje się filozofem”.*

**Profesor Robert N. Boyd**

„Essentially, all models are wrong, ... but some are useful.”

Georg E.P. Box

---

# Dziękuję za uwagę



# INSTYTUT CHEMICZNEJ PRZERÓBKİ WĘGLA

ul. Zamkowa 1 • 41-803 Zabrze

Telefon: **32 271 00 41**  
Fax: **32 271 08 09**

E-mail: **office@ichpw.pl**  
Internet: **www.ichpw.pl**

NIP: **648-000-87-65**  
Regon: **000025945**



**CENTRUM BADAŃ TECHNOLOGICZNYCH**  
Tel. sekretariat 32 271 00 41 w. 300  
Tel. Dyrektor Centrum 32 271 00 41  
e-mail: cit@ichpw.pl



**CENTRUM BADAŃ LABORATORYJNYCH**  
Tel. sekretariat 32 271 00 41 w. 200  
Tel. Dyrektor Centrum 32 271 00 41  
e-mail: cba@ichpw.pl

