

基于分层数据驱动机器学习的生物炭定向制备及强化厌氧消化研究

蒋榆丞, 于麒麟*, 张耀斌*

(大连理工大学 环境学院 工业生态与环境工程教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024)

摘要: 生物炭是强化厌氧消化的关键材料, 然而受限于“制备条件-理化特征-微生物-产甲烷”之间的复杂关系, 且现有研究多忽略微生物这一关键要素, 其定向优化仍面临挑战。为此, 针对以高粱秸秆为主的厌氧消化过程, 构建了一种基于分层数据驱动的机器学习模型(HDML), 旨在实现从特征解析到生物炭的定向制备的精准指导。通过梯度提升回归(GBR)算法, 对 258 组文献数据与自有实验数据(占比 34.8%)进行了深度挖掘。首先, 在输入层确定粒径(PS)与比表面积(SSA)为影响甲烷产量的主要物理特征, 并据此筛选出具有较高产甲烷潜力的生物炭类型(C1)。为进一步提升模型预测准确性, 通过特征重要性分析, 引入了与产甲烷路径相关较强的核心微生物——甲烷菌属 *Methanocelleus* 和候选菌群 *Candidatus_Caldatribacterium* 的相对丰度, 作为过程层变量, 对模型进行迭代优化。优化后的模型性能得到提升, 均方根误差(RMSE)由原来的 73.21 降低至 36.19, 决定系数(R^2)由 0.85 提升至 0.87, 进而确定更优的生物炭制备条件: 热解温度 650 °C、升温速率 15 °C/min(标记为 T650)。实验验证显示, T650 制备的生物炭体系在输出层, 即甲烷产量较空白对照组(无生物炭)提升了 51%, 较第一阶段未包含过程层优化的 C1 组进一步提升 18.9%。此外, 体系展现出更优的 pH 缓冲能力与挥发性脂肪酸(VFA)分解效率, 主要归因于最佳粒径与高比表面共同优化的孔隙结构, 有效增强了系统对抑制物的缓冲吸附能力, 同时促进了功能微生物间的直接种间电子传递(DIET)。综上所述, HDML 有效解析了“制备条件-理化特征-微生物-产甲烷”间的复杂关系, 为生物炭的智能化设计与定向制备提供了创新范式。

关键词: 厌氧消化; 生物炭制备; 分层机器学习; 微生物; 直接种间电子传递

中图分类号: X705

文献标识码: A

Hierarchical Data-Driven Machine Learning for Targeted Biochar Preparation and Enhanced Anaerobic Digestion

JIANG Yucheng, YU Qilin*, ZHANG Yaobin*

(Key Laboratory of Industrial Ecology and Environmental Engineering, Ministry of Education, School of Environmental Science and Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Biochar plays a pivotal role in enhancing anaerobic digestion (AD) for organic waste treatment and bioenergy recovery. By facilitating direct interspecies electron transfer (DIET) and buffering acidity, biochar can substantially improve system stability. However, the practical application of AD is often limited by the accumulation of volatile fatty acids (VFAs) and the high sensitivity of methanogens to environmental fluctuations. Although biochar provides a potential solution, its directional optimization remains challenging due to the complex, non-linear correlations among

收稿日期: 2026-02-02

修回日期: 2026-02-27

接受日期: 2026-03-06

DOI: 10.20078/j.eep.20260305

基金项目: 工业生态与环境工程教育部重点实验室开放基金(KLIEEE-23-01)资助项目

第一作者: 蒋榆丞(2001—), 男, 云南昆明人, 硕士研究生, 主要研究方向为人工智能机器学习促进厌氧消化。E-mail: 17380607231@163.com

*通讯作者: 于麒麟(1994—), 男, 山东泰安人, 副教授, 主要研究方向为厌氧生物处理及资源化。E-mail: qilin_yu@dlut.edu.cn

张耀斌(1971—), 男, 辽宁大连人, 教授, 主要研究方向为有机废物的生物天然气制取、污水资源化处理、场地修复与温室效应、微生物呼吸新原理等。E-mail: zhangyb@dlut.edu.cn

preparation conditions (e.g., pyrolysis temperature and heating rate), physicochemical properties, microbial community dynamics, and methanogenesis. Moreover, most machine learning (ML) studies treat the AD process as a "black box," mapping input materials directly to output yields while neglecting the microbial community as an essential intermediate process layer. Consequently, such models lack interpretability and fail to reveal how material properties regulate functional microbiota to improve performance. To bridge material science and microbial ecology with a primary focus on utilizing sorghum stalk, we developed a Hierarchical Data-Driven Machine Learning (HDML) framework that follows a strict "Preparation–Property–Microbe–Performance" logic. Using a Gradient Boosting Regression (GBR) algorithm, we compiled 258 datasets from the literature and our own experiments (in-house data accounted for 34.8%). The modeling was conducted in two stages to resolve the mechanism layer by layer. First, at the input layer, the model identified particle size (PS) and specific surface area (SSA) as the primary physical features governing methane yield; based on these criteria, a biochar variant with high methanogenic potential (C1) was initially screened. Second, to improve model accuracy, we introduced key microorganisms that were highly related to the methanogenic pathway by means of feature-importance analysis. Specifically, the relative abundances of the functional taxa *Methanocelleus* and *Candidatus_Caldatribacterium* were quantified as process-layer variables for iterative model refinement. Inclusion of this microbial process layer markedly enhanced model performance: the root mean square error (RMSE) decreased from 73.21 to 36.19, and the coefficient of determination (R^2) increased from 0.85 to 0.87. Guided by the optimized model, the global optimal preparation conditions were determined as a pyrolysis temperature of 650 °C and a heating rate of 15 °C/min (T650). Experimental validation showed that the methane yield in the T650 biochar system increased by 51% compared with the blank control (no biochar) and by 18.9% relative to the C1 group prepared without inclusion of the process layer. The T650 system also exhibited stronger pH buffering capacity and higher VFA degradation efficiency. These improvements are mainly attributed to a pore structure jointly optimized by the ideal PS and high SSA, which enhanced adsorption and buffering of inhibitory compounds and promoted DIET among enriched functional microorganisms. Overall, our findings demonstrate that HDML can elucidate the continuum from preparation conditions and physicochemical properties to microorganisms and methanogenesis, offering an interpretable and robust paradigm for the intelligent design of biochar.

Keywords: Anaerobic digestion; Biochar preparation; Machine learning; Microorganisms; Direct interspecies electron transfer (DIET)

0 引 言

厌氧消化是处理有机固体废物并回收生物能源的可行技术之一^[1]。然而在实际工程应用中,厌氧消化系统常表现出运行稳定性差^[2]、产气率低等问题,特别是产甲烷古菌(*Methanocelleus*等)对环境波动敏感^[3],易受到挥发性脂肪酸(VFAs)积累^[4]或高浓度氨氮的抑制^[5],导致系统运行失稳甚至酸败。

投加生物炭是提高系统运行稳定性^[6]、改善运行效能的有效策略^[7]。生物炭不仅具有较大的比表面积,能为微生物提供充足的生长繁殖空间,

还具有一定的电容性与导电性。研究表明,生物炭的电化学性质可服务于微生物之间的长距离电子传递,可替代传统的种间氢传递方式^[8],加速丙酸等有机酸的转化,从而突破厌氧的限速步骤^[9]。

然而,生物炭对厌氧消化的影响主要取决于其理化特征^[10],如生物炭的孔隙结构^[11]、元素组成、电化学活性,而这些理化特性又与其制备条件密切相关,如热解温度^[12]、升温速率等^[13]。由于涉及变量众多,不同底物对生物炭特性的依赖存在显著差异。目前,生物炭应用主要依赖传统的单因素试错法,不仅耗时费力,且挂一漏万,难以解析多变量间的复杂交互作用^[14],导致文献报道中

经常出现相互矛盾的结论^[15]。例如,一部分研究发现生物炭的高导电性有益于厌氧消化^[16],而另一部分研究则发现过量生物炭因过度吸附底物而抑制厌氧消化^[17]。

机器学习(Machine Learning, ML)凭借其强大的数据挖掘与非线性拟合能力^[18],已被广泛应用于厌氧消化的建模与预测^[19]。然而,现有研究在建模时^[20],大多将生物炭的制备条件(如温度)与生物炭的理化特征(如粒径)作为输入层,预测输出层的甲烷产量,忽略微生物这一关键特征。少数研究引入了微生物群落作为特征值之一^[21],但是将其与生物炭的制备参数混合,一并输入。显然,微生物群落与生物炭制备条件等,不是一个逻辑层面的概念。作为输入层的参数应当可主动调节,而微生物群落(如丰度)是被动结果,往往很难直接调节。如果将微生物特征与生物炭制备条件同时作为输入层,模型只能得出“某种微生物丰度高则产气多”的表象结论,却无法解释“究竟将生物炭制备条件调节至何种数值^[22],才能定向富集特定功能微生物”这一核心机制。这导致模型缺乏可解释性,无法有效指导工程设计。

为此,本文率先提出了一种分层数据驱动机器学习(Hierarchical Data-driven Machine Learning, HDML),将建模输入过程拆解为两层,第一层为输入层,先筛选出产气效果最佳的生物炭应具备

的理化参数;第二层为过程层,单独分析微生物,考察富集关键微生物最有利的生物炭制备条件。其主要逻辑:先确定温度如何改变生物炭,再确定生物炭如何影响微生物。通过这种分层设计,修正只以生物炭关键物理特征(如粒径和比表面积等)的建模局限,形成兼顾关键微生物富集的最佳生物炭制备条件,以最大化提升厌氧消化效能。

1 材料与方法

1.1 HDML 的构建与数据分层架构

为解析生物炭强化厌氧消化的多维关系,构建了一种分层数据驱动机器学习(HDML)(流程见图1)。从文献^[23]和实验室获得的258组生物炭强化厌氧过程的生物炭制备参数与理化特征、厌氧消化性能、微生物相对丰度等方面的数据集,分别构建输入层、过程层和输出层。输入层主要包含生物炭制备参数,如热解温度、升温速率、保温时间,以及关键理化特征,包括粒径(PS)、比表面积(SSA)、电导率(EC)与主要元素组成,即C、H、O、N等。过程层主要为关键功能微生物的相对丰度,典型代表为产甲烷古菌 *Methanocellus*^[24]和产酸细菌 *Candidatus_Caldatribacterium*^[25]。输出层主要为累积甲烷产量(MY)。

因部分原始数据存在缺失值,采用基于随机森林的 MissForest 算法^[26]进行非参数迭代插补,

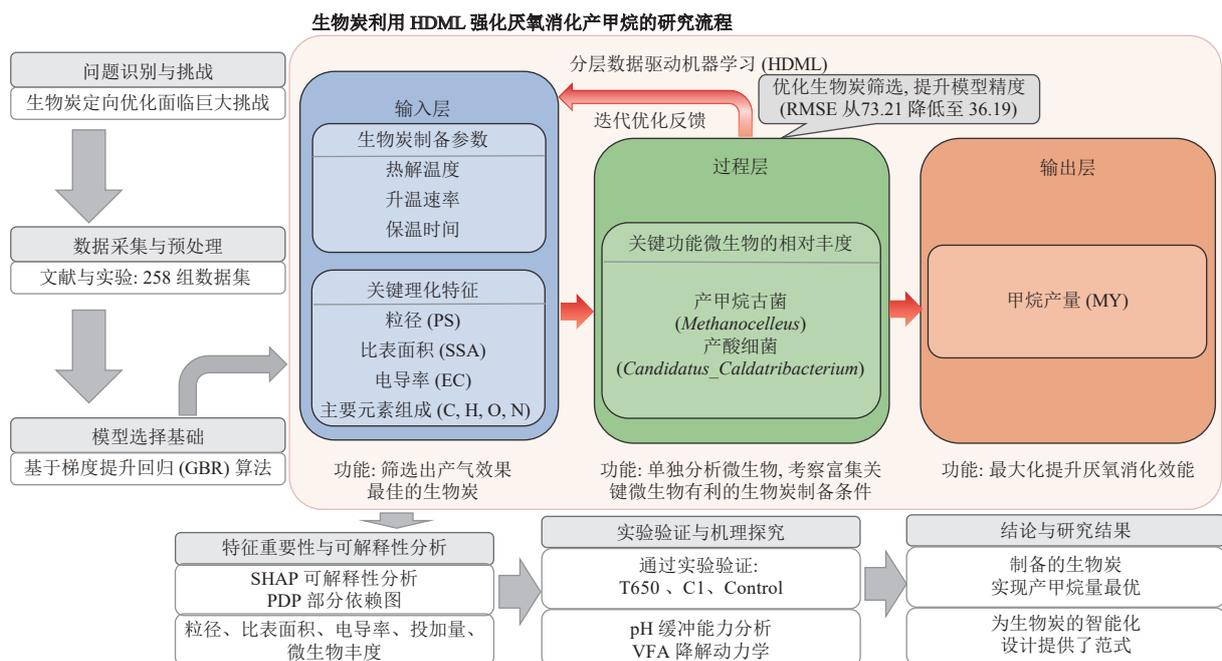


图1 基于分层数据驱动的机器学习循环具体流程图

Fig. 1 Specific flowchart of the Hierarchical data-driven machine learning cycle

以补充缺失数据,最大限度保留数据的原始分布特征^[27]。

1.2 机器学习建模与特征解析

对比3种树模型:梯度提升回归(GBR)、随机森林(RF)及极端梯度提升(XGBoost)对甲烷产量的预测精度,选择决定系数(R^2)最接近于1、均方根误差(RMSE)最小的模型作为后续建模的核心算法。在选择模型前,为保证模型训练与评估的有效性,数据集按8:2划分为训练集与测试集。采用网格搜索寻找最优解,结合五折交叉验证,评估模型稳定性,以优化模型中无法通过数据直接学习的超参数,比如树模型的树的数量等。采用决定系数与均方根误差评价模型精度。

利用SHAP(Shapley Additive Explanations)技术^[28],定性并量化各特征对产气性能的总体贡献与正负效应;此外,引入部分依赖图(PDP),展示单个或多个特征,如PS、SSA对模型预测结果的影响。同时,采用双变量交互分析探究两个特征交互作用对结果的影响,从中获取特征间的关系和影响规律,进而反向追踪实现该最佳属性所需

的生物炭最佳制备条件,包括制备温度、升温速率、保温时间等。

为进一步确证上述HDML模型在解析“制备条件-理化特征-微生物-产气效能”关系时的适用性,本研究对纳入建模的258组样本进行了全维度的统计学检验,结果见表1。生物炭制备条件与理化性质参数覆盖范围广、梯度设置充分,热解温度(300~800℃)的跨度较宽,导致了生物炭粒径(0.05~1.50mm)与比表面积(8.50~340.20m²/g)呈现出较高的标准差分布(分别为0.32mm和65.80m²/g),这确保了模型能够充分学习从“致密结构”到“高孔隙结构”的特征对应;微生物过程层具有深度,其中关键功能微生物(*Methanocelleus*)丰度实现了从痕量检出至最高22.50%的富集,为模型捕捉“微生物-产气”提供了数据支撑;输出响应具有代表性,其中甲烷产量(MY)在12.50~485.30mL/g VS范围内呈现近似正态分布(均值(226.45±73.21)mL/g VS),涵盖了从低效抑制到高效促进的完整区间。

表1 数据集输入与输出变量的统计描述(N=258)

Table 1 Statistical description of input and output variables for the dataset (N=258)

变量类型	特征名称	单位	缩写	最小值	最大值	均值	中位数	标准差
输出变量	甲烷产量	mL/g VS	MY	12.50	485.30	226.45	215.80	73.21
制备条件	热解温度	℃	Temp	300.0	800.0	545.0	550.0	142.5
	升温速率	℃/min	Rate	1.0	20.0	9.8	10.0	4.2
	保温时间	h	Time	0.5	6.0	2.5	2.0	1.2
理化性质	粒径	mm	PS	0.05	1.50	0.58	0.50	0.32
	比表面积	m ² /g	SSA	8.5	340.2	118.6	105.4	65.8
	生物炭投加量	g/L	BCA	0	30.0	12.5	10.0	7.5
	电导率	mS/cm	EC	0.2	185.5	42.3	35.6	38.1
元素组成	碳含量	%	C	42.5	91.2	68.4	69.5	12.6
	氮含量	%	N	0.20	4.50	1.35	1.10	0.85
	氧含量	%	O	3.5	28.4	14.2	13.5	6.4
关键微生物丰度*	<i>Methanocelleus</i>	%	/	0	22.50	2.85	1.90	3.10
	<i>Candidatus_Caldatribacterium</i>	%	/	0	5.40	0.95	0.65	0.82

*注:微生物丰度代表过程层建模中使用的相对丰度数值。

上述数据分布特征证明了所选数据集具有良好的代表性,足以支撑后续基于SHAP的特征重要性解析与基于PDP的生物炭制备参数的反向优化。

1.3 生物炭制备与验证实验设计

基于1.2节构建的机器学习模型与特征解析结果,以及生物炭的最佳制备条件,开展生物炭制备与厌氧消化实验,以检验模型在指导生物炭优

化方面的有效性。

以高粱秸秆为原料^[29-30],在管式炉中制备2种生物炭C1与T650,均粉碎、筛分至模型优化出的适宜粒径^[31]。其中,C1为只经过输入层,而未过程层优化模型的参照组,即仅通过生物炭制备条件与理化特征(如热解温度、升温速率等)建模,而未通过关键功能微生物相对丰度建模。T650为经过含有微生物丰度过程层后的模型优化组,即通过输入层和过程层,得到的最佳生物炭制备条件。

在37℃恒温厌氧瓶(有效体积200 mL)中,验证以上2种生物炭的最佳制备条件和理化特征。以葡萄糖为底物,接种物(厌氧颗粒污泥)取自大连某污水处理厂,接种物与底物的体积比设定为2:1。设置T650组、C1组及无生物炭添加的空白对照组(CG)进行对比,其中C1组与T650组的生物炭投加量为模型给出的最优投加量,粒径为模型给出的适宜粒径。

通过检测C1与T650的甲烷产量差别,确定“过程层”引入后对预测效果的影响;通过检测生物炭组与空白组的产甲烷差别,验证输入层,即适宜的生物炭粒径、比表面积对预测的贡献;最终通过输出层指标产甲烷量,以及实验验证指标,即pH、VFAs和氨氮含量,完成对整个HDML的实际验证。

1.4 分析方法与表征手段

采用扫描电子显微镜观测生物炭的表面微观

形貌^[32];利用BET法测定比表面积及孔隙结构;通过傅里叶变换红外光谱分析表面官能团。

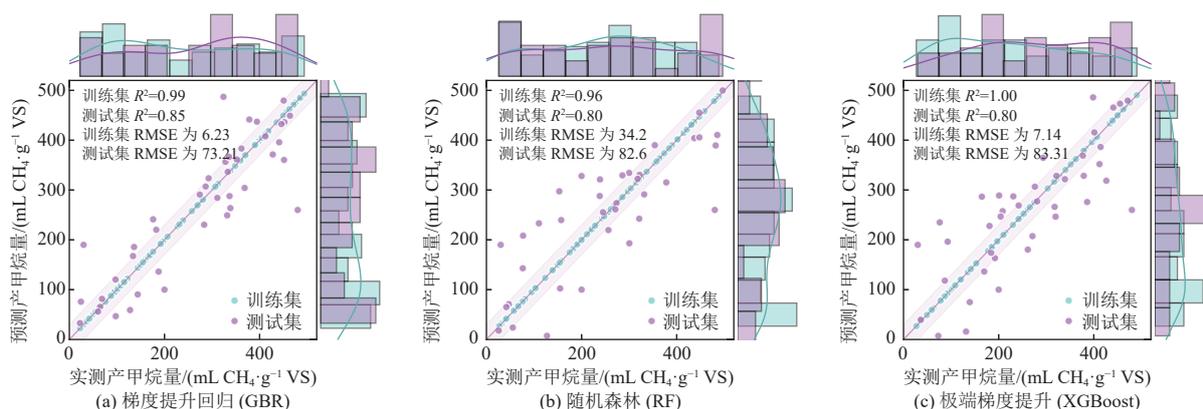
每日记录产气量(湿式流量计法),并利用气相色谱仪(GC, Agilent 7890B)分析甲烷含量。定期采集液相样本,测定pH、VFAs及氨氮浓度,以分析系统的代谢稳定性。

2 结果与讨论

2.1 树基机器学习模型的性能评估与优选

鉴于厌氧消化系统的高度复杂性,收集的258组数据集表现出显著的“高维(特征数 ≥ 15 个)、小样本(样本量 < 300 个)”特点,传统线性回归难以捕捉变量间复杂的非线性关系。为筛选出各组数据误差较小的预测模型,将输入层主要的生物炭特性、输出层的产甲烷量,以及过程层的微生物丰度放入以下模型:随机森林、极端梯度提升和梯度提升回归,对比各模型的确定系数和均方根误差。

结果显示(图2),GBR模型在各项指标上均表现最优。具体而言,如图2(a)所示,GBR对甲烷产量的预测决定系数(R^2)达到0.85,均方根误差控制在73.21,优于RF($R^2=0.80$,图2(b))和XGBoost($R^2=0.80$,图2(c))。这表明GBR模型通过其“逐步修正误差”的学习方式,有较高的预测精度,可能缓解因实验样本量有限造成的过拟合问题。因此,选取GBR模型作为后续特征解析与参数优化的模型。



注:顶、右侧边际直方图(青色为训练集,紫色为测试集)分别展示实测、预测产甲烷量频率分布,叠加核密度估计(KDE)曲线表征数据分布集中趋势,下同。

图2 3种不同模型对甲烷产量数据集的预测结果

Fig. 2 Prediction results of three different models on the methane yield dataset

2.2 基于SHAP值的关键特征识别与制备优化

为探求输入变量对厌氧消化性能即甲烷产量的影响,综合了基于GBR树模型的独立特征重要

性分析(图3(a))与SHAP可解释性分析(图3(b))。

2.2.1 影响厌氧产气的生物炭关键特征识别

对于甲烷产量(图3),输入层的生物炭物理性

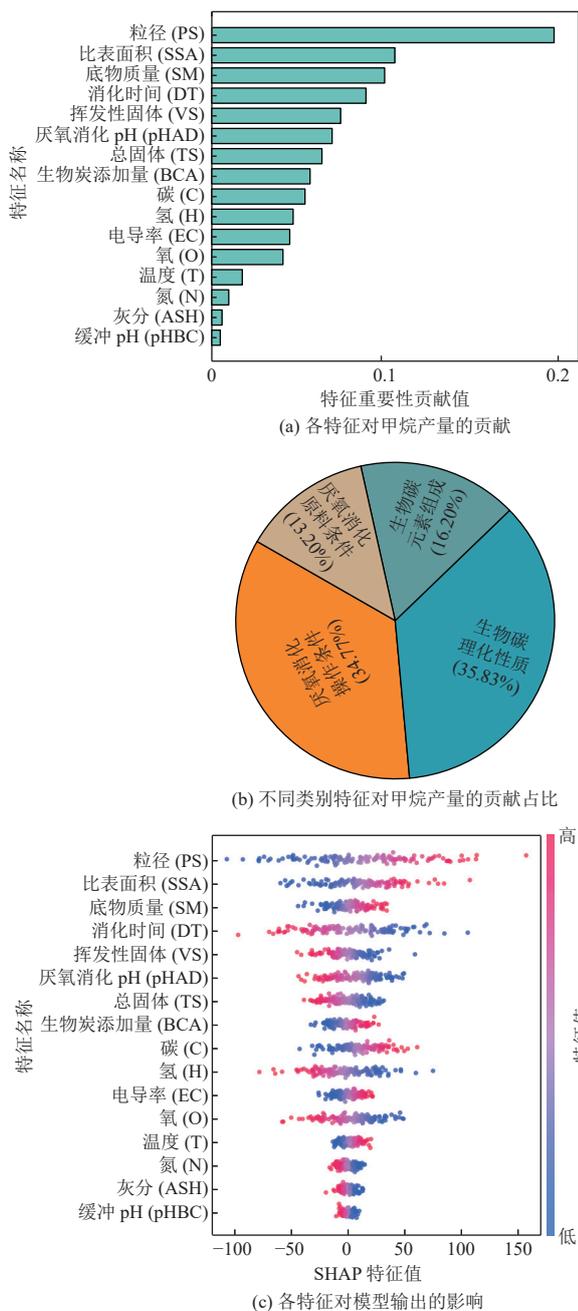


图 3 甲烷产量(MY)的特征重要性与 SHAP 值分析
 Fig. 3 Feature importance and SHAP value analysis of methane yield (MY)

质,即粒径、比表面积起主导作用,其重要性权重高于输入层的化学组分及操作条件。这表明,在厌氧消化体系中,生物炭首先作为“物理载体”发挥作用,而非化学作用。其中,较小粒径可增大外比表面积,提升生物炭与底物及微生物的接触几率、强化传质过程来提高输出层产甲烷量;而高比表面积生物炭,可为微生物提供长距离电子传递的附着位点。

如图 3(a)(b),除生物炭粒径与比表面积外,

生物炭投加量与电导率在特征排序中紧随其后,且 SHAP 摘要图显示其高值区域主要分布在 SHAP 轴的正向区间(图 3(c))。这表明,合理的投加策略以及生物炭的导电特性也是促进产气效能提升的关键特征。其中,生物炭的导电特性意味着其具备作为电子传递介体的潜力,能够促进微生物间的电子传递和还原二氧化碳为甲烷。

2.2.2 生物炭关键特征值

采用部分依赖图(PDP),解析了输入层关键特征对输出层甲烷产量的非线性影响及边际效应,以确定生物炭制备的最佳条件。

粒径的单变量分析表明(图 4(a)),生物炭粒径对产气性能存在显著区间敏感性:甲烷产量在粒径 0.3~0.5 mm 区间达峰值,而粒径>1.0 mm 时因比表面积降低,可能发生沉降,减弱了固液接触,致甲烷产量减少;粒径<0.1 mm 则易引发微孔堵塞、传质受阻,从而性能下降。这表明,0.5 mm 是兼顾悬浮稳定性与传质效率的最佳粒径。

比表面积的单变量分析表明(图 4(b)),比表面积与甲烷产量呈正相关。随着比表面积增加,甲烷产量逐步增加,但在 250~300 m²/g 达到稳定。

此外,电导率与生物炭投加量的分析可进一步完善优化策略。图 4(c)所示,当输入层的电导率值处于 10~35 mS/cm 时,电导率对产气量表现出显著正向贡献。其虽在权重排序中次于物理结构(图 3(a)),但从侧面印证了生物炭作为“电子导体”参与种间电子传递的潜在机制。

图 4(d)所示,针对底物投加量分析,产气增益在生物炭投加 15 g/L 后进入平台期。这说明过量生物炭不能持续提升效能,反而可能增加体系黏度或过度吸附底物产生抑制。因此,将 15 g/L 确定为后续验证实验的生物炭投加量。

尽管单变量 PDP 分析分别界定了作为输入层的粒径和比表面积的最佳区间,但未能揭示二者在复杂体系中可能的共同作用。为此,引入双变量交互分析进行验证。结果如图 4(e),仅优化单一指标(如仅有高比表面积但粒径过大)难以实现最优产气;在生物炭粒径为 0.5mm 且比表面积>250 m²/g 时,系统获最大理论产甲烷量(图 4(e)红色高值区域)。考虑到热解条件影响生物炭的粒径和比表面积,需控制生物炭制备的热解条件,以保证输入层中的最佳生物炭粒径和最佳比表面积,实现输出层厌氧消化效能提升。

根据 PDP 分析(图 4(e)),为了获得最优的比

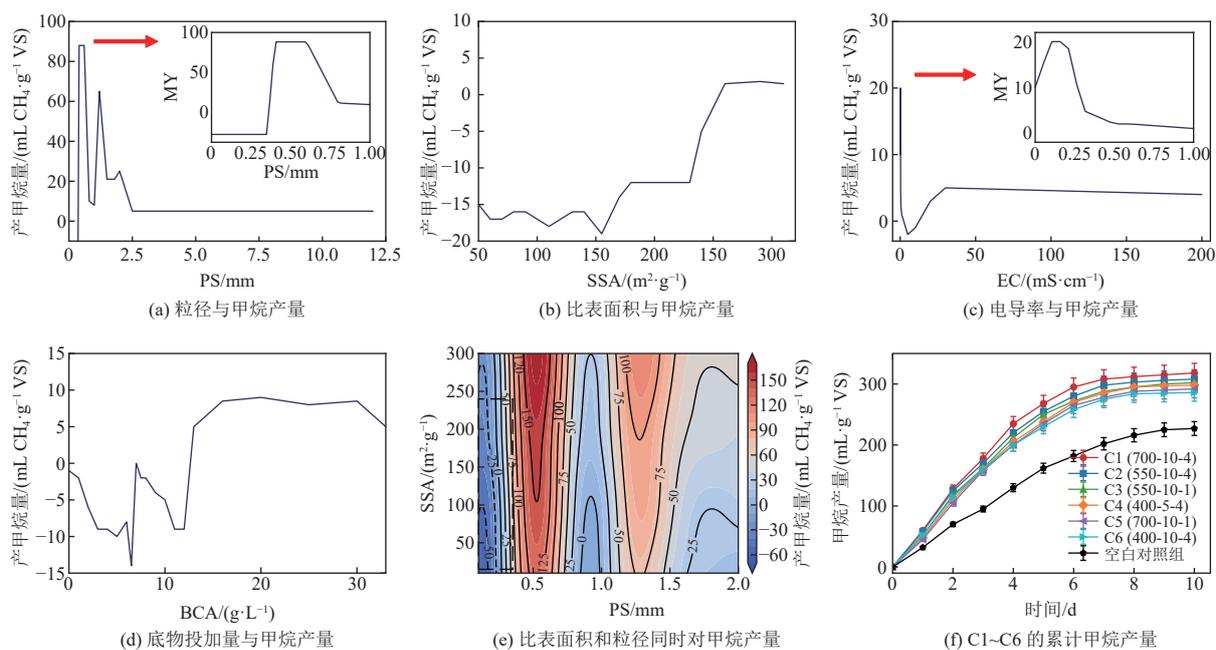


图 4 针对甲烷产量 (a~d) 一维部分依赖图与 (e) 二维特征交互部分依赖图; (f) 6 种生物炭甲烷产量对比

Fig. 4 (a-d) One-dimensional partial dependence plots and (e) two-dimensional feature interaction PDPs for methane yield (MY). (f) Comparison of methane yields across six types of biochar

表面积和粒径, 模型推导出生物炭的制备温度为 700 °C、升温速率为 10 °C/min, 此条件下制备的生物炭即为 C1。

为验证模型准确性, 对比了不同制备温度 (400、550、700 °C)、升温速率 (5、10 °C/min) 与保温时间 (1、4 h) 的 6 组生物炭 (编号 C1~C6)。如图 4(f) 所示, C1 (700 °C、10 °C/min、保温 4 h) 的累积甲烷产量在所有组别中表现最佳, 验证了仅以生物炭理化性质和制备条件为输入层, 而未引入微生物数据作为过程层的模型准确性。

2.3 基于微生物过程层的二次优化与参数修正

为了突破仅依赖物理属性 (如粒径) 优化的局限, 构建了包含微生物特征这一过程层的增强模型。该模型揭示了微生物丰度对系统最终产出的决定性权重, 并据此得到了最优的生物炭制备条件。

2.3.1 过程层微生物的引入与关键特征识别

如图 5(a) 和 5(c) 所示, 模型识别出氢营养型古菌 *Methanococcus* 和产酸细菌 *Candidatus_Caldatribacterium* 是决定甲烷产量的核心微生物。

根据图 5(b)、5(d) 的部分依赖图所示, 当 *Methanococcus* 的相对丰度达到 3.0% 左右, 且 *Candidatus_Caldatribacterium* 维持在 1.7% 左右时, 系统的产气效果达到最高。这为生物炭的优化设定了微生物学目标, 即制备的生物炭须有利

于这两类菌群的富集。

2.3.2 从 C1 到 T650 的参数迭代

为了满足图 5(b)、5(d) 所示的最佳微生物丰度需求, 将以上 2 种关键微生物丰度作为过程层变量, 导入模型, 进行第二阶段迭代。如图 6(a) 所示, 增强模型的测试集 RMSE 显著降低至 36.19, 优于第一阶段的 RMSE (73.21) (图 2(a))。这表明微生物丰度的加入补充了关键信息缺失, 提升了模型对复杂厌氧体系的解释能力。

根据第二阶段迭代结果, 确定了生物炭的制备条件。如图 6(b)(c), 将热解温度微调至 650 °C 并将升温速率提升至 15 °C/min, 即为 T650。该条件制得的生物炭可能构建出更适宜关键菌群生长与代谢的厌氧消化系统, 从而实现最优的产甲烷量。

2.4 HDML 的实验验证与迭代增效评估

为了验证 HDML “分层迭代” 策略的有效性, 进行如下对比实验: 将第一阶段无过程层模型预测的最优解 C1, 即热解温度 700 °C、升温速率 10 °C/min、粒径 0.5 mm 左右生物炭, 与第二阶段经过程层微生物修正后的最优解 T650, 即热解温度 650 °C、升温速率 15 °C/min、粒径 0.5 mm 的生物炭, 以及空白对照组 CG (无生物炭) 进行对产甲烷对比。其中, 两组生物炭的投加量均为 15 g/L, 该数值基于图 4(d) 分析确定的最佳投加量。

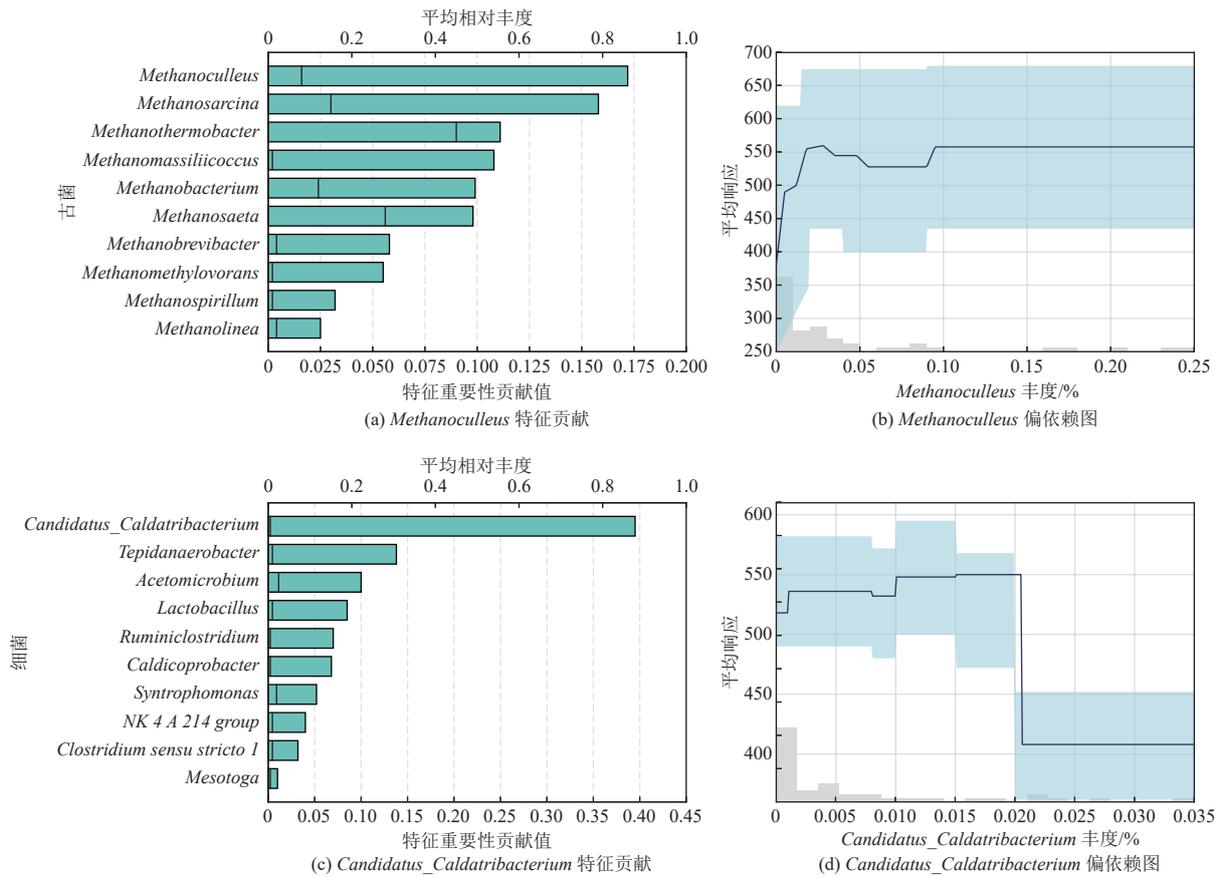


图 5 偏相关图: (a) 古菌与沼气产率, 红线代表各变量的平均值; (b) *Methanoculleus* 浓度对甲烷产量的平均响应; (c) 细菌与沼气产率; (d) *Candidatus_Caldatribacterium* 浓度对甲烷产量的平均响应

Fig. 5 Partial correlation plots: (a) archaea versus biogas yield, with the red lines representing the average values of each variable. (b) mean response of methane production to *Methanoculleus* concentration. (c) Bacteria versus biogas yield. (d) mean response of methane production to *Candidatus_Caldatribacterium* concentration

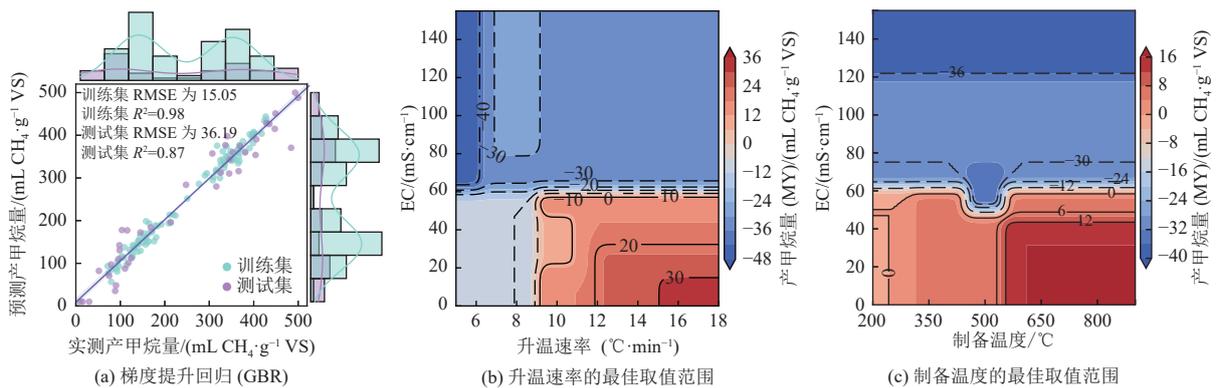


图 6 经过过程层强化后的甲烷产量数据集的模型预测结果与制备条件交互优化热力图

Fig. 6 Model prediction results of the methane yield dataset and heatmap for interactive optimization of preparation conditions after process-layer enhancement

(1) 产气效能的提升

实验结果(图 7(a)~(c))证实, 依据输入层模型制备的 C1 生物炭, 其累积甲烷产量达到 280 mL/g VS, 相比空白组 CG 提升 51%。这证明了模型在第一阶段对生物炭特性探究的准确性, 即提升了

甲烷产量。经过过程层优化后的 T650 组, 其累积甲烷产量达到 (333.51 ± 6.76) mL/g VS。相比于 C1, T650 生物类实现了 18.9% 的额外产气效能提升。这一数据证明了引入微生物过程层的重要性, 富集特征微生物参数的加入, 弥补了仅以生物

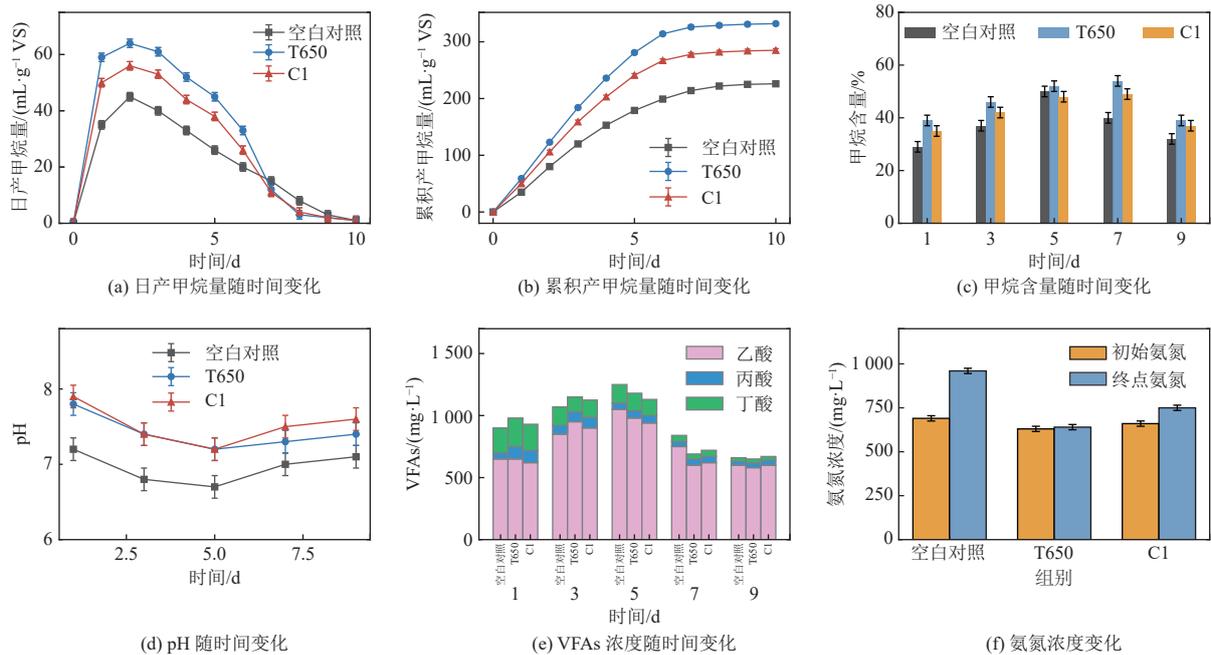


图 7 添加 T650 和 C1 生物炭的厌氧消化系统产气性能

Fig. 7 Biogas production performance of anaerobic digestion systems supplemented with T650 and C1 biochars

炭理化指标为变量所产生的偏差,由此进一步优化了生物炭的制备条件。

(2) 系统稳定性的增强

实验进一步印证了加入过程层微生物这一特征后 T650 生物类表现出较优的运行稳定性。T650 组 pH 波动更小(图 7(d))。同时,如图 7(e)所示,在启动期的 VFA 降解斜率高于 C1 组;T650 组反应末期氨氮浓度也低于对照组(图 7(f)),说明优化后的生物炭孔隙结构增强了对抑制物的吸附缓冲能力。

T650 组的实验结果与模型预测的吻合,实验中甲烷产量的提升验证了模型关于 T650 制备条件更优的预测,证实了 HDML 构建的模型能够有效解析复杂的“制备条件-理化特征-微生物效能”关系,实现了从“数据获取与处理”到“生物炭设计”再到“产气提升”的闭环。

为了进一步评估 HDML 模型指导下的 T650 生物炭的优越性,将研究结果与近期相关文献进行了横向对比。现有研究多侧重于通过单一物理或化学改性来提升生物炭性能。例如,JIANG 等^[33]通过酸碱改性优化生物炭孔隙结构,使厌氧消化甲烷产量提升了 26.5%;HE 等^[34]利用高温热解制备的高导电性生物炭,通过强化种间电子传递(DIET)实现了 32.4% 的产气增益。相比之下,制备的 T650 体系实现了 51% 的甲烷产率显著提

升。这种性能差异主要归因于 HDML 模型的“双阶段”策略。模型不仅优化了生物炭的物理传质特性(粒径与比表面积),更关键的是通过过程层参数定向筛选了更有利于 *Methanocellus* 等富集的制备条件,从而协同强化了电子传递效率与 VFAs 降解动力学,提升了传统单因素改性促进厌氧消化的能力。

3 结 论

本文首次构建了分层数据驱动机器学习,用于实现从特征解析到生物炭的定向制备。基于表现较优的 GBR 模型,揭示了生物炭理化特征和制备条件是影响产气效能的主要特征,具体参数为粒径约 0.5 mm、比表面积>250 m²/g,据此筛选出生物炭 C1 的制备条件。进一步引入微生物过程层进行迭代修正,确定了兼顾特征微生物富集的最佳生物炭 T650,其制备条件参数设定为热解温度 650 °C、升温速率 15 °C/min,同时满足生物炭粒径和比表面积的最佳条件。实验结果显示,T650 实现了(333.51 ± 6.76) mL/g VS 的最高产气量,相比无添加生物炭的空白组与第一阶段优化的 C1 组分别提升了 51% 和 18.9%。本研究有效解析了复杂特征间的影响,实现了从特征解析到定向制备的优化,为生物炭在厌氧消化工程的实际应用提供理论指导。

参考文献 (References) :

- [1] NAYERI D, MOHAMMADI P, BASHARDOUST P, et al. A comprehensive review on the recent development of anaerobic sludge digestions: Performance, mechanism, operational factors, and future challenges[J]. *Results in Engineering*, 2024, 22: 102292.
- [2] AJAYI BANJI A, RAHMAN S. A review of process parameters influence in solid-state anaerobic digestion: Focus on performance stability thresholds[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2022, 167: 112756.
- [3] VALENTIN M T, LUO Gang, ZHANG Shicheng, et al. Direct interspecies electron transfer mechanisms of a biochar-amended anaerobic digestion: A review[J]. *Biotechnology for Biofuels and Bioproducts*, 2023, 16(1): 146.
- [4] BESCHKOV V N, ANGELOV I K. Volatile fatty acid production vs. methane and hydrogen in anaerobic digestion[J]. *Fermentation*, 2025, 11(4): 172.
- [5] YUAN Haiping, ZHU Nanwen. Progress in inhibition mechanisms and process control of intermediates and by-products in sewage sludge anaerobic digestion[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2016, 58: 429–438.
- [6] PAN Junting, MA Junyi, LIU Xiaoxia, et al. Effects of different types of biochar on the anaerobic digestion of chicken manure[J]. *Bioresource Technology*, 2019, 275: 258–265.
- [7] HOANG A T, GOLDFARB J L, FOLEY A M, et al. Production of biochar from crop residues and its application for anaerobic digestion[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 363: 127970.
- [8] ZHANG Kaoming, DENG Yuepeng, LIU Zhiqian, et al. Biochar facilitated direct interspecies electron transfer in anaerobic digestion to alleviate antibiotics inhibition and enhance methanogenesis: A review[J]. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2023, 20(3): 2296.
- [9] SUN Ziyang, FENG Lu, LI Yeqing, et al. The role of electrochemical properties of biochar to promote methane production in anaerobic digestion[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 362: 132296.
- [10] DENG Chen, LIN Richen, KANG Xihui, et al. What physicochemical properties of biochar facilitate interspecies electron transfer in anaerobic digestion: A case study of digestion of whiskey by-products[J]. *Fuel*, 2021, 306: 121736.
- [11] ZHANG Hongqiong, WANG Xu, QIAN Zhaojing, et al. Effects of biowaste-derived hydrochar on anaerobic digestion: Insights into hydrochar characteristics[J]. *Journal of Renewable Materials*, 2023, 11(10): 3647–3657.
- [12] BARDI M J, MUTUNGA J M, NDIRITU H, et al. Effect of pyrolysis temperature on the physicochemical properties of biochar and its potential use in anaerobic digestion: A critical review[J]. *Environmental Technology & Innovation*, 2023, 32: 103349.
- [13] ZHAO Weixin, YANG Haizhou, HE Shufei, et al. A review of biochar in anaerobic digestion to improve biogas production: Performances, mechanisms and economic assessments[J]. *Bioresource Technology*, 2021, 341: 125797.
- [14] DENG Ying, ZHANG Yifan, ZHAO Zhiqiang. A data-driven approach for revealing the linkages between differences in electrochemical properties of biochar during anaerobic digestion using automated machine learning[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 927: 172291.
- [15] GALAL O H, ABDEL DAIEM M M, ALHARBI H S, et al. Mathematical modeling and machine learning approaches for biogas production from anaerobic digestion: A review[J]. *BioResources*, 2025, 20(4): 11237–11266.
- [16] WANG Zixin, ZHANG Cheng, WATSON J, et al. Adsorption or direct interspecies electron transfer A comprehensive investigation of the role of biochar in anaerobic digestion of hydrothermal liquefaction aqueous phase[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 435: 135078.
- [17] LI Jiakang, QIU Chunsheng, LIU Nannan, et al. Impact of biochar prepared at different pyrolysis temperatures on the methane production and microbial community structure of food waste anaerobic digestion[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, 96: 860–869.
- [18] LI Jie, ZHANG Le, LI Chunxing, et al. Data-driven based in-depth interpretation and inverse design of anaerobic digestion for CH₄-rich biogas production[J]. *ACS ES& T Engineering*, 2022, 2(4): 642–652.
- [19] RUTLAND H, YOU J, LIU Haixia, et al. A systematic review of machine-learning solutions in anaerobic digestion[J]. *Bioengineering*, 2023, 10(12): 1410.
- [20] LONG Fei, WANG Luguang, CAI Wenfang, et al. Predicting the performance of anaerobic digestion using machine learning algorithms and genomic data[J]. *Water Research*, 2021, 199: 117182.
- [21] PEI Zhanjiang, LIU Shujun, JING Zhangmu, et al. Understanding of the interrelationship between methane production and microorganisms in high-solid anaerobic co-digestion using microbial analysis and machine learning[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 373: 133848.
- [22] SAIF I, SALAMA E S, USMAN M, et al. Improved digestibility and biogas production from lignocellulosic biomass: Biochar addition and microbial response[J]. *Industrial Crops and Products*, 2021, 171: 113851.
- [23] KHAN M, CHUENHART W, SURENDRA K C, et al. Applications of artificial intelligence in anaerobic co-digestion: Recent advances and prospects[J]. *Bioresource Technology*, 2023, 370: 128501.
- [24] LI Aihua, ZHANG Baocai, LI Wentao, et al. Quorum-sensing molecules regulate biochar-assisted anaerobic digestion system for methane production: Single-stage vs. two-

- stage digestion[J]. *Renewable Energy*, 2024, 235: 121367.
- [25] SINGH S, KEATING C, IJAZ U Z, et al. Molecular insights informing factors affecting low temperature anaerobic applications: Diversity, collated core microbiomes and complexity stability relationships in LCFA-fed systems[J]. *Science of the Total Environment*, 2023, 874: 162420.
- [26] STEKHOVEN D J, BÜHLMANN P. MissForest—non-parametric missing value imputation for mixed-type data[J]. *Bioinformatics*, 2012, 28(1): 112–118.
- [27] KHASHABA N H, ETTOUNEY R S, ABDELAAL M M, et al. Artificial neural network modeling of biochar enhanced anaerobic sewage sludge digestion[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2022, 10(4) : 107988.
- [28] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2017). Long Beach: Neural Information Processing Systems Foundation, 2017: 4768–4777.
- [29] PETER D, MOHAMMED A, ESENOWO J K, et al. Effect of biochar application on biogas production from cattle paunch content[J]. *ACS Omega*, 2025, 10(25) : 26975–26983.
- [30] 袁文典, 于麒麟, 张耀斌. 白腐菌与厌氧污泥共培养强化秸秆湿式厌氧发酵 [J]. *能源环境保护*, 2024, 38(1) : 76–84.
- YUAN Wendian, YU Qilin, ZHANG Yaobin. Enhanced wet anaerobic digestion of straw by co-culture of white-rot fungus and anaerobic sludge[J]. *Energy Environmental Protection*, 2024, 38(1): 76–84.
- [31] CAI Yafan, ZHENG Zehui, WEI Lingxia, et al. The characteristics of multi-substrates (low and high C/N) anaerobic digestion: Focus on energy recovery and the succession of methanogenic pathway[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 343: 125976.
- [32] GARCÍA PRATS M, GONZÁLEZ D, SÁNCHEZ A. Characterization of biochars of different origin and application to the anaerobic digestion of source-selected organic fraction of municipal solid waste under batch conditions and at different dosages[J]. *Frontiers in Chemical Engineering*, 2024, 6: 1384495.
- [33] HE Zhangwei, LI Aihua, TANG Congcong, et al. Biochar regulates anaerobic digestion: Insights to the roles of pore size[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 480: 148219.
- [34] JIANG Qian, WU Ping, ZHANG Xuedong, et al. Deciphering the effects of engineered biochar on methane production and the mechanisms during anaerobic digestion: Surface functional groups and electron exchange capacity[J]. *Energy Conversion and Management*, 2022, 258: 115417.