

机器学习驱动生物炭材料制备与应用的研究进展

高佳昕, 张伟进, 郭孝彬, 詹昊, 冷立健*, 李海龙

(中南大学能源科学与工程学院, 湖南长沙 410083)

摘要: 生物炭是由生物质或有机固废经热化学转化制得的富碳固体材料, 因其高碳含量、多孔结构及可调表面官能团, 在农林、环境、能源等领域具有广阔应用前景。然而, 传统生物炭制备多依赖经验试错, 面对原料多样性、工艺复杂等挑战, 短周期难以实现定向制备与应用落地。近年来, 以随机森林、神经网络等为代表的机器学习算法成为解决上述问题的关键工具, 通过构建“原料特征-工艺条件-结构性质-应用性能”的预测模型, 可识别关键影响因素(如原料中的碳含量、灰分等), 明晰其对生物炭性质及吸附、催化等性能的影响规律。进而实现原料的筛选、工艺参数的优化, 推动生物炭按需定向设计。本文系统综述了生物炭的应用领域、描述符体系、建模预测和智能设计思路, 为机器学习驱动生物炭高效制备与应用提供新视角与正向或反向优化策略。然而, 当前模型多基于实验室尺度数据, 向工业级装置跨尺度迁移过程中面临数据分布差异和模型泛化不足等瓶颈, 是未来亟须突破的关键难题。

关键词: 生物炭; 生物质; 机器学习; 热解; 碳材料; 预测优化

中图分类号: X505; X705 **文献标识码:** A

Machine Learning-Aided Intelligent Preparation and Applications of Biochar from Biomass

GAO Jiaxin, ZHANG Weijin, GUO Xiaobin, ZHAN Hao,
LENG Lijian*, LI Hailong

(School of Energy Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: Biochar is a carbon-rich solid produced from biomass or organic solid waste via thermochemical conversion and has attracted extensive attention across agriculture, forestry, environmental remediation, energy, chemical engineering, and materials science. Owing to its high carbon content and stability, biochar can serve as an effective solid fuel and a promising material for carbon sequestration. Its porous structure and tunable surface functional groups also make it highly effective in applications such as adsorption, catalysis (including catalyst supports), soil amendment, and hard-carbon anodes for energy storage systems. Despite these advantages, traditional biochar development still depends heavily on empirical trial-and-error and labor-intensive experiments. This approach faces major challenges arising from the wide diversity of biomass feedstocks, the complexity of carbonization and activation parameters, and the limited controllability of biochar structure and performance. These factors hinder rapid preparation, precise design, and efficient scale-up. In recent years, machine learning has become a core tool for data-driven modeling, prediction, and optimization, and it has been increasingly applied to biomass thermochemical conversion, biochar preparation, and biochar-based applications. By establishing predictive links among feedstock characteristics, process

收稿日期: 2026-01-27

修回日期: 2026-03-13

接受日期: 2026-03-20

DOI: 10.20078/j.eep.20260318

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52576250)

第一作者: 高佳昕(2001—), 男, 湖南常德人, 硕士研究生, 主要研究方向为生物质组分预测及定向热转化。E-mail: 1043544832@qq.com

张伟进(1998—), 男, 江苏南通人, 博士研究生, 主要研究方向为人工智能驱动的生物质转化与碳捕集。

E-mail: 952347227@qq.com

*通讯作者: 冷立健(1987—), 男, 湖南邵阳人, 教授, 主要研究方向为生物质热转化与资源化。E-mail: lljchs@126.com; l.leng2019@csu.edu.cn

conditions, structural properties, and application performance, machine learning helps identify key governing factors and clarify their influence patterns. It can rapidly predict structural features such as pore structure, surface area, degree of graphitization, and surface functional groups, as well as application-oriented properties including adsorption capacity, catalytic activity, electrochemical performance, and environmental functionality. More importantly, through forward prediction, inverse design, and multi-objective optimization, machine learning offers powerful strategies for intelligent feedstock screening, process-parameter optimization, and dynamic control, enabling the targeted design of high-performance biochar tailored to specific applications. This review systematically summarizes the main application areas of biochar; the descriptor systems used to characterize feedstocks, processing conditions, and biochar properties; and recent advances in modeling, performance prediction, and intelligent design strategies driven by machine learning. Particular emphasis is placed on how machine learning can reveal hidden relationships among composition, structure, and performance, accelerate the transition from empirical experimentation to rational design, and substantially improve research and development efficiency. We also discuss current limitations in the literature, including insufficient quantity and quality of data, descriptor inconsistency, weak model interpretability, and limited cross-scale generalization from laboratory systems to pilot or industrial processes. Overall, this review aims to provide a comprehensive reference and strategic guidance for accelerating machine learning-driven biochar preparation, optimization, and applications, and to promote the transition of biochar materials from laboratory research to engineering practice.

Keywords: Biochar; Biomass; Machine learning; Pyrolysis; Carbon materials; Prediction and optimization

0 引言

随着全球能源危机、气候变暖 and 环境污染问题的日益严峻,寻找可持续的能源和资源(如碳材料)替代化石燃料/资源^[1-2],是解决上述问题的关键途径^[3]。生物炭作为重要的碳载体,是一种优质的高碳固体燃料和减缓温室气体排放的高品位碳汇,被认为是推动实现碳中和目标的可行路径之一^[3-4]。目前,生物炭在固体燃料替代、土壤改良与储碳减排、污染物吸附与环境治理、催化反应以及能源转化与储能等领域展现出良好的应用前景。

生物炭原料来源广泛,涵盖农业废弃物、木材残渣、食物废弃物、动物粪便、污泥及其他有机固体废物^[5]。这些原料/固废的产生量明显超过了自然承载能力,若处置不当,可能会对环境系统(如水生生物、大气环境和土壤生物群落)构成威胁^[6]。传统处置方式如焚烧、厌氧消化、好氧发酵与饲料化等虽已广泛应用^[7],但仍面临温室气体排放、周期较长,以及对场地与管理条件依赖较高等限制。将生物质通过热解或其他碳化转化为生物炭的路径受到高度关注,其优势在于协同实现废弃物减量化与碳封存^[8-9]。例如,热解技术可在不同

工况下将生物质转化为气体和液体燃料,同时生成碳固体残留物生物炭^[10-11],从而在一定程度上缓解传统处理方式带来的固废与温室气体的排放,推动生物炭产业化与市场化进程。

然而,传统生物炭制备方法在可控性和效率方面仍面临许多挑战。生物炭的传统制备方法主要包括热解碳化、水热碳化和气化等过程。这些工艺通常涉及将生物质加热至一定的温度范围,并在缺氧或低氧的环境中进行反应。热解碳化是最常见的制备生物炭工艺。生物质在热解炉内加热至 300~700 °C,分解生成固体生物炭、气体(如 CO₂、CO、CH₄)和液体(如生物油)^[12],但其性能优化与过程控制高度依赖经验与重复试验。其原因在于生物炭的结构与性能受到多变量协同影响,导致原料、工艺与性质之间的映射关系复杂且难以预测^[13]。例如,提高热解温度能够增强碳化程度并提高碳含量,但也可能引发孔结构重构,进而改变比表面积与吸附位点分布,最终影响生物炭的吸附与催化性能。与此同时,生物质原料在元素组成、灰分与热反应路径方面存在显著差异,从而导致碳化产物的化学组成、物理结构和应用性能呈现巨大差异^[14]。因此,在应用端如何短时间

内筛选出优质原料、设计好最佳碳化工艺,成为当前研究的难点之一。

随着大数据和人工智能技术飞速发展,基于机器学习的生物质智能定向热转化制备高性能生物炭逐渐成为研究热点(图 1)。利用机器学习实现生物炭工程优化设计已取得实质成效:第一,生物质原料端快速筛选与分级,利用元素组成、工业组成与生化组分等描述符识别高潜力原料;第二,工艺端参数寻优与敏感性识别,针对温度、停留时间、反应气氛、升温速率和活化剂剂量等变量建立模型,进行重要性分析;第三,结构与性能的跨尺度预测,从孔隙结构、官能团、表面电性等结构指标到吸附容量、催化活性、电化学容量等应用指标实现快速评估,用于缩小实验空间;第四,面向目标性能的正向预测与筛选优化以及反向设计,在成本与过程边界约束下反推可行的工艺组合,推动从经验试错走向目标导向的全局优化。

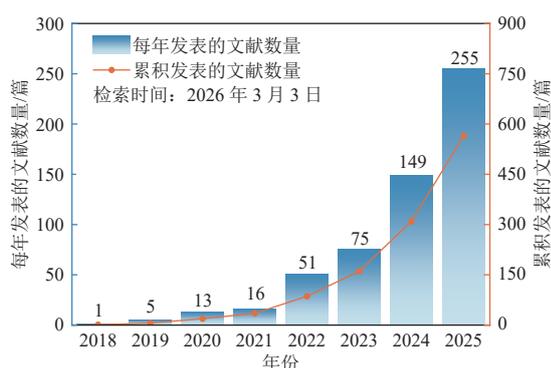


图 1 基于 Scopus 数据库关键词("Machine learning" and "Biochar")已发表的文献数量

Fig. 1 Number of publications based on keywords ("Machine learning" and "Biochar") from the Scopus database

生物炭预测模型应用落地的关键取决于描述符体系的构建与质量控制。描述符是连接生物质原料、工艺参数与生物炭结构和性能的桥梁,应面向实际工程可获得性与可解释性,由基础变量到结构表征,再到多模态信息的分层体系,以支撑可靠预测与优化决策。本文围绕生物炭应用场景、描述符体系、建模预测与智能设计策略系统综述现有进展,总结其在原料筛选、工艺优化与目标性能定向设计中的成效,并进一步讨论数据标准化、模型可解释性与工程应用等关键挑战,提出生物炭正向和反向优化策略,以加速机器学习驱动生物炭从实验室走向规模化应用的进程。

1 生物炭应用领域

1.1 固体燃料领域

生物炭的应用正从替代锅炉燃料向高性能特定燃料转化,有潜力成为多个行业的碳中和解决方案。例如,通过选择高热值、低灰分的木质原料(如木材废料),并利用快速热解或中温热解技术,可高效生产出高固定碳、高能量的优质燃料炭^[15]。针对冶金还原剂等特定工业需求,则可通过调整热解工艺或后续活化改性,提升其反应活性与机械强度,从而替代传统焦炭^[16]。

1.2 土壤改良领域

在土壤改良领域,生物炭的研究由来已久,潜力突出^[17]。其改良效应主要体现在提升土壤的保水、保肥能力,并中和酸性土壤,提升土壤阳离子交换量以及增加土壤微生物的活性来改善土壤质量^[18-19]。生物炭含有高浓度的氮、磷、钙和钾,这些元素可直接为土壤提供养分。然而,其供养效果高度依赖原料类型、热解条件、灰分组成与施用剂量等因素。若使用不当,生物炭对土壤的生物、化学和物理性质可能产生负面影响^[20]。生物炭土壤改良通常兼顾储碳减排,一方面,施用生物炭可增加土壤的有机碳,通过储存生物炭中的碳和降低土壤碳矿化速率等增强土壤汇碳;另一方面,生物炭可通过改善土壤结构与通气性、调控含水率与氧化还原环境以及影响微生物代谢过程,降低土壤温室气体排放强度(如 CO₂ 与 N₂O),并提升温室气体减排效益。

1.3 污染物吸附与环境治理领域

在污染物吸附与环境治理领域,通过调控生物炭的比表面积、孔隙结构以及表面官能团特征,生物炭被开发为高效吸附材料,用于吸附水、气及土壤等环境介质中的各种有机和无机污染物^[21-22]。例如, XU 等^[23-25]利用稻壳和粪便产生的碳化物去除水溶液中铅、铜、锌和镉等重金属。LIU 等用酸和碱活化的生物炭吸附四环素等有机污染物^[26-27]。HUANG 等^[28]利用微波热解稻草生物炭用于 CO₂ 吸附,其吸附能力达到 80 mg/g。此外,生物炭还可吸附土壤中的重金属、有机污染物(农药、多氯联苯)、新兴污染物(抗生素、内分泌干扰素),使生物炭应用潜力得以充分发挥。

1.4 催化领域

在催化领域,生物炭因具备成本较低,且可在热解或气化过程中原位生成和使用等优势,常被

用作生物油催化提质或合成气净化的催化剂。生物炭对焦油提质或催化的活性与其孔径、比表面积和矿物质含量有关^[29]。负载金属的生物炭催化剂兼具还原、吸附等多重功能,对焦油的去除率可达到 90% 以上^[30-31]。首先,生物炭可将金属氧化物还原为金属态,从而提高负载金属催化剂催化性能;其次,生物炭具有助催化剂和吸附剂的作用,能够吸附金属离子和焦油,从而促进焦油的重整过程。磺化处理的生物炭作为一种高比表面积和酸密度的固体催化剂,在生物柴油生产中展现出高催化活性和可重复使用性^[32]。生物炭基铁纳米颗粒催化剂可将合成气转化为液态烃,CO 转化率超过 90%,液态烃选择性高达 70%^[33]。此外,经过物理和化学活化的生物炭也常常用于污染物的催化降解^[34-35]。

1.5 能源转化与储能领域

在能源转化与储能领域,生物炭的应用亦呈现快速增长的趋势。碳材料凭借高导电性、孔结构可调与电化学稳定性被用作超级电容器电极。生物炭电极的电容表现通常受表面官能团、电导率、孔径分布及比表面积的协同影响^[36-37]。生物炭还可作为钠离子电池负极材料,例如花生壳硬碳负极在 $30 \text{ mA} \cdot \text{g}^{-1}$ 的电流密度下可逆钠存储容量达 $357.55 \text{ mA} \cdot \text{h} \cdot \text{g}^{-1}$ ^[38]。此外,生物炭等碳材料因化学稳定性、可逆性和价格较低等多方面优势,

在储氢等领域崭露头角^[39]。

综上,生物炭在传统和新兴领域的诸多应用不仅拓展了生物炭的功能边界,也对其结构可设计性与制备过程可控性提出了更高要求。

2 生物炭相关描述符

2.1 生物质原料组成性质

生物质原料描述符体系是构建机器学习模型并实现生物炭设计的基础,系统地表征了原料的化学组成、物理结构及热化学反应行为(图 2)。由于生物质热解过程中存在多条竞争反应路径,描述符的完整性与可解释性直接决定模型的泛化能力与可迁移性。通常而言,元素组成、生化组成与工业分析构成了描述原料的核心信息,其中元素组成(碳、氢、氧、氮、硫及其原子比等)不仅反映原料碳化潜力,也常被用于推断其潜在生化组成与热解行为(表 1),是生物质最重要的描述符^[40]。GAO 等^[41]利用生物质的元素组成通过一种聚类-回归机器学习模型,实现了生物质的分类及关键生化组成的预测。LENG 等^[42-43]利用生物质元素组成进一步实现了蛋白类和木质纤维类生物质生化组成(蛋白质、木质素等)及其单体(氨基酸、木质素单体等)的预测,证明了生物质元素组成与生化组成、单体组成紧密联系,也是表征生物质重要的定量信息。工业分析作为生物质的另一

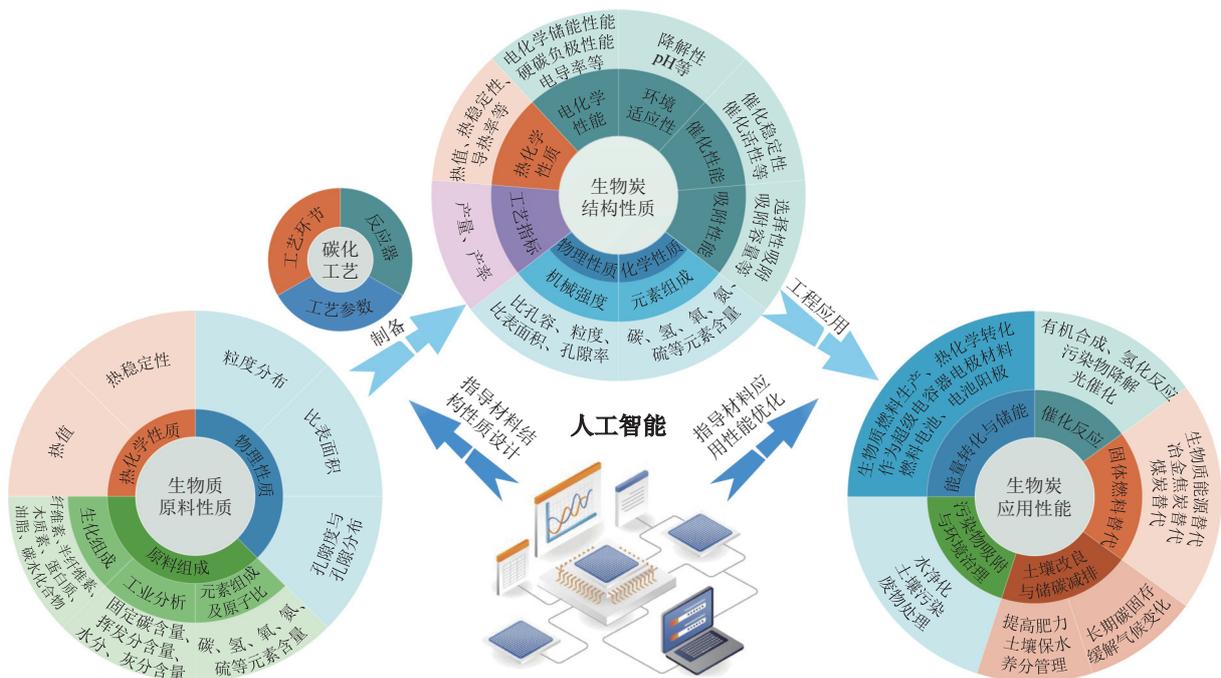


图 2 生物质和生物炭描述符

Fig. 2 Descriptors for biomass and biochar

表 1 生物质制备生物炭相关描述符

Table 1 Descriptors related to biochar preparation from biomass

参数类型	描述符	分析测试方法	
原料组成	元素组成(碳、氢、氧、氮、硫等元素的含量)及原子比	元素分析法(如CHNS分析、X射线荧光分析)	
	生化组成(蛋白质、油脂、碳水化合物、纤维素、半纤维素、木质素含量)	凯氏定氮法、索氏提取法、酸水解法、热解-质谱联用	
	工业分析(水分、挥发分、固定碳、灰分含量)	工业分析: 热重分析, 灰化法, 烘干法	
生物质	粒度分布	激光粒度分析	
物理性质	比表面积	BET比表面积测试	
	孔隙度与孔径分布	氮气吸附-脱附实验、孔隙分析	
热化学性质	热值	燃烧热值测定	
	热稳定性	热重分析	
反应器	固定床、流化床、回转窑、螺旋反应器、微波反应器等	/	
碳化工艺	工艺环节	干燥、预热、热解/碳化、活化、冷却、尾气处理等	
工艺参数	温度、气氛、压力、时间、加热方式、催化剂等	温控系统、压力传感器、计时器等	
工艺指标	产量、产率	差重法	
化学性质	元素组成(碳、氢、氧、氮、硫等元素的含量)	元素分析法	
物理性质	比表面积、密度、孔隙率、孔容、粒度、机械强度等	BET比表面积测试、孔隙分析、氮气吸附-脱附实验、激光粒度分析、压缩测试、拉伸测试等	
生物炭	热化学性质	热值、导热率、热稳定性等	燃烧热值测定, 热重分析等
	吸附性能	吸附容量、选择性吸附等	吸附实验等
	催化性能	催化活性、催化稳定性等	催化实验、反应动力学测试、长期催化实验等
	电化学性能	电导率、电化学储能性等	电化学测试、循环伏安法、电容测试等
	环境适应性	pH、降解性等	pH测定法、物降解试验、环境暴露实验等

基础表征,可测定原料水分、挥发分、固定碳与灰分含量,直接关联热解产气倾向、固体残留潜力及无机相产生。

物理性质描述符,如粒度分布、比表面积及初始孔隙结构,影响热传递效率与挥发分的扩散行为,从而间接调控生物炭的孔隙大小(表 1)。热化学性质描述符,特别是通过热重分析获得的热稳定性曲线及衍生的动力学参数,可为量化原料的热解反应活性提供关键依据。

然而,为实现更精准的逆向设计,描述符体系值得进一步深入研究。原料的结构(如纤维素的结晶度)与表面化学性质(如含氧官能团的种类与数量)可通过 X 射线衍射与傅里叶变换红外光谱等方法表征。这些特征对热解初期反应机制及生物炭的表面性质具有预见性。此外,灰分的详细化学组成(尤其是碱金属的含量)是影响热解催化

作用、焦油裂解及孔隙形成的关键因素,需通过等离子体发射光谱等技术进行量化。

2.2 生物炭制备技术参数

生物炭的制备方式多样,通过特定的温度、压力、加热速率和停留时间等参数组合,定向调控热化学转化路径,可获得具有不同结构和功能的产物(表 2)。

热解是在缺氧、300~700 °C 的温度和常压下以缓慢的加热速率(1~10 °C/min)进行,通常在间歇式固定床反应器中实现^[44-46]。其工艺核心在于促进生物质的纤维素、半纤维素和木质素碳化发生缩聚与芳构化反应,因此生物炭产率较高,可达约 35%~50%。一般而言,随着热解温度的升高,生物炭产率下降,合成气产率增加。热解温度的升高还会导致生物炭的碳含量、比表面积和孔隙度增加,炭表面氧官能团数量减少^[47]。

表 2 生物炭制备方式

Table 2 Production methods for biochar

制备方式	温度范围/℃	压力	加热速率	停留时间	常用设备	产物特点
慢速热解	300~700	常压	1~10 °C/min	0.5~24.0 h	间歇式固定床反应器	产炭率高(约35%~50%)
中速热解	400~600	常压	10~100 °C/min	5~30 min	移动床反应器	产炭率中等(约20%~35%)
快速热解	400~600	常压	100~1 000 °C/s	0.5~5.0 s	流化床反应器	产炭率低(约10%~20%)
微波热解	400~700	常压或真空	10~100 °C/min	10~120 min	微波反应腔体	生物炭独特的孔隙结构, 性质均一
烘焙	200~300	常压	10~50 °C/min	10~120 min	回转窑/回转炉	生产优质固体燃料、碳材料前驱体
水热碳化 (湿式烘焙)	180~300	高压 (2~10 MPa)	1~10 °C/min	0.5~8.0 h	高压反应釜	水热炭, 含氧官能团丰富, 炭产率高
气化	600~1 200	常压	> 50 °C/min	秒到分钟级	固定床气化炉	产炭率低(<10%)

中速热解和快速热解则显著提高了反应的热动力学强度。中速热解温度范围在 400~600 °C, 停留时间缩短至分钟级, 常用移动床反应器, 生物炭产率约 20%~35%, 较好地平衡了炭产率与孔隙大小(表 2)。快速热解在相似温度区间内, 以极快的加热速率和秒级短停留时间在流化床中完成反应, 通过快速脱挥发分和抑制二次裂解, 最大化提高液体产率, 但固体产率仅为 10%~20%, 所得生物炭往往含有较多活性位点和一定孔隙^[48]。

与传统热解相比, 微波辅助热解采用内部加热方法且加热均匀, 因其高转换效率、高热解效率、低能耗等优点而越来越受学者关注^[49]。微波辅助热解产生的生物炭具有高生物炭产率, 优异的性能以及良好的吸附性效率^[50]。

烘焙通常在 200~300 °C 的相对低温、惰性气体气氛中进行, 反应历时数分钟至数小时(表 2)。这一过程本质上是一种温和的热解, 旨在去除生物质中的挥发性成分, 同时最大限度地保留固定碳^[51]。

生物质的水热碳化(湿式烘焙)避免了原料干燥能耗, 通过水解、脱水、缩合等反应, 将高湿生物质直接转化为富含含氧官能团的“水热炭”, 产炭率高且表面化学性质丰富, 特别适合用于污染物吸附或催化剂载体(表 2)^[52]。

气化是在高温(600~1 200 °C)和限氧条件下进行, 以产生合成气为主, 副产物生物炭的产率较低(<10%)^[53-54]。此类生物炭经历高温重整, 灰分含量高, 碳结构高度有序化。

综上, 制备方式的选择实质是对热化学转化强度与路径的调控, 直接影响了生物炭的产率、孔隙结构、表面化学和稳定性, 是碳化性能优化的决

策变量。

2.3 生物炭结构性质及应用性能

生物炭的描述符可系统性地分为工艺指标、化学性质、物理性质、应用性能描述符等层次。工艺指标是首要的宏观描述符, 其中产量和产率直接反映了制备过程的经济性与碳保留效率, 通常在固定床反应器中通过精确的质量计量获得(表 1)。

化学性质描述符, 特别是元素组成及其原子比, 是评估生物炭碳化程度、稳定性、表面极性和反应活性的基石, 对生物炭吸附、催化等性能影响巨大(图 2)^[55]。例如, 生物炭中的氮含量被确定为影响生物炭在土壤中吸附固定重金属的最重要因素^[56-57]。

生物炭的结构骨架由其物理性质决定, 其中比表面积、孔隙率、孔容及孔径分布(通过氮气吸附-脱附等温线表征)决定了材料的吸附位点数量与传质效率(图 2)^[58]。粒度分布与机械强度则影响着生物质在实际中的应用(如土壤改良及修复), 二者分别通过激光粒度仪和力学测试设备进行量化^[59]。

应用性能描述符直接指向特定应用场景。热化学性质, 如热值和热稳定性, 关联着生物炭作为能源载体或高温材料的潜力^[60]。吸附性能描述符(如对特定污染物的平衡吸附容量、吸附速率、选择性系数等)和催化性能描述符(如转化率、周转频率、循环稳定性)通过标准化的批次实验或连续流反应测试获得, 是评估其环境修复与工业催化效能的关键(表 1)^[61]。新兴应用领域的拓展催生了电化学性能描述符, 如电导率、比电容和循环寿命, 通过电化学工作站进行系统测试^[62]。最后, 环

境适应性描述符,如 pH 和生物降解性,决定了其在生态环境中的相容性与长期归趋,是评估其环境安全与可持续性的重要依据^[63]。

3 机器学习预测生物炭结构性质和应用性能

3.1 机器学习建模

基本机器学习过程包括特征工程(数据收集及预处理)、模型筛选、模型调优、模型解释以及模型共享界面。数据收集是机器学习的初始核心步骤,数据的输入和输出描述符变量需要可靠的文献及实验,可通过数据提取软件收集,如 PlotDigitizer 和 Getdata^[64]。当输入特征数量远大于输出变量数量时,可能需要通过降维(即主成分分析、判别分析和独立成分分析)整合特征。统计分析显示所有特征的数据分布,并可进一步检验异常值。如果不同变量的值范围变化较大,则进行数据归一化,将这些数据转换至 [-1, 1] 区间。数据收集和预处理后,应根据不同数据集体量大小选择合适的机器学习算法。为平衡模型的准确性和泛化性,整体数据中 70%~90% 的数据通常随机选择用于训练机器学习模型,其余数据作为测试数据,这对模型评估至关重要。机器学习模型有 2 种参数,称为模型参数和超参数。模型参数是模型内部的配置变量(例如神经网络模型中的神经元权重系数),其值可基于数据体量大小进行估计。超参数是模型外部的配置(例如基于树的

模型中决策树深度),其值无法直接从数据训练中确定。超参数通常用于配置机器学习模型或最小化的损失函数特定算法,必须在机器学习模型开发前进行调整,因为它们定义了模型框架。机器学习训练模型的超参数必须进行调优,在避免过拟合前提下,K 折交叉验证是确定最优超参数的高效方法^[65]。K 折交叉验证的最优平均性能与最优超参数对应。最终的机器学习模型用测试数据进行评估。一般而言,用决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)评估回归模型。然而,仅依赖这些评估指标无法解释输入特征对输出的影响和机制。因此,采用特征重要性分析和偏依赖图来研究输入与输出之间的相关性^[66]。最后,可以通过在线平台和离线应用开发图形用户界面,输入自变量的值来快速获得输出值,使得用户获得良好的预测体验^[65]。

机器学习算法可分为 3 类:监督学习、半监督学习和无监督学习(表 3)。经典且常见的算法,如随机森林(RF)、决策树(DT)、支持向量机回归(SVR/SVM)和多层感知器(MLP),可在不同领域应用。许多机器学习库和框架可用于执行机器学习算法,例如 Scikit-learn、TensorFlow、PyTorch 和 Keras。超参数调整可以手动实现(如网格搜索或随机搜索),也可以通过优化算法自动实现。由于手动优化超参数计算成本高,更倾向于使用优化算法来寻找最佳的超参数。粒子群优化、遗传算

表 3 3 种机器学习方式对比表

Table 3 Comparison of three machine learning approaches.

对比维度	监督学习	半监督学习	无监督学习
核心定义	使用既有特征又有标签的数据训练模型,学习从输入到输出的映射关系	使用少量标签数据和大量无标签数据联合训练,结合两者优势提升学习效果	使用完全无标签的数据训练模型,让模型自己发现数据内在的结构和规律
主要任务	分类、回归	分类、回归	聚类、降维、关联规则挖掘、异常检测
常见算法	DT、RF、SVM、KNN、MLP等	GNN、半监督SVM、Transformer、基于生成式的模型等	K-Means、GMM、PCA、t-SNE、自编码器
优点	精度高;结果明确;评价指标清晰(准确率、召回率等);可解释性强	成本效益高;数据利用率高:贴近真实世界(标签少,数据多);性能潜力大	数据零成本:无需人工标注;探索性强:能发现未知的模式和分组;数据预处理:可用于降维和可视化
缺点	成本高昂:标注数据耗时费力;泛化风险;领域局限	假设依赖:假设不成立时效果差;算法复杂;错误传播	评估困难:没有标准答案,结果难以量化评估;结果不确定;调参复杂
应用场景	生物炭结构性质预测或应用性能预测	跨研究数据整合,标签稀疏且口径不一;工艺放大早期,过程数据多但质量标签少	原料或生物炭进行分群分类、工艺条件的反应区间识别、异常检测与数据质控

注:KNN:K近邻算法;GNN:图神经网络;GMM:高斯混合模型;PCA:主成分分析。

法、模拟退火算法以及贝叶斯优化被推荐用于超参数优化。

3.2 生物炭产率与化学结构性质预测

机器学习作为一种高效的热解行为建模工具,可用于预测产生理想产物分布所需的热解条件。ZHU等^[67]基于RF模型以生物质原料性质(元素组成和生化组成)和热解条件为输入参数,预测了生物炭产率和碳含量,发现热解条件是主要因素,其对生物炭产率的相对贡献达65%。混合模型有望成为提升模型预测性能的有效策略之一,HAQ等^[68]通过学习树-粒子群优化集成模型以生物质性质(工业组成、元素组成、生化组成)和热解条件(温度、速率、时间)为输入参数预测了生物炭产率, R^2 为0.99, RMSE为2.33%,预测值与实验值之间的偏差小于2%。

生物炭化学结构性质,包括元素组成、固定碳、挥发分和灰分含量等,已被多种机器学习技术成功预测。LI等^[69]利用生物质原料成分和热解条件基于多层感知神经网络(MLP-NN)和自适应神经模糊推理系统(ANFIS)模型成功预测了生物炭的元素组成和工业组成,其 R^2 超过0.88。SHAHBEIK等^[70]采用RF模型,成功预测了污泥生物炭的H/C、H/N和O/C比值,预测结果的 R^2 超过0.90。PAN等^[71]还利用ANFIS和最小二乘支持向量机(LS-SVM)模型预测生物炭芳香度,碳含量被确定为影响芳香度的主要因素。

3.3 生物炭应用性能预测

阐明生物质类型、碳化工艺与生物炭能量含量之间的关系,是实现生物炭规模化能源利用的前提。应用端真正的痛点并不在于“能否预测”,而在于能否在低成本表征条件下实现稳定预测,并能指导工艺选择。热值等燃料指标的直接测试往往成本高且周期长,因此更合理的路线是以原料组成与可在线获取的工艺变量为核心输入,构建可解释的模型,用于快速筛选原料,确定参数窗口。MARI和BALASUBRAMANIAN^[72]通过极端梯度提升(XGBoost)基于生物质原料组成和微波热解条件,预测生物炭产率和燃料性能($R^2 = 0.91$),微波功率被认为是主导因素。JIANG等^[73]基于线性回归(LR)、SVM和RF等多种机器学习方法,预测了由NaOH/KOH催化稻草衍生的热解炭的燃烧活化能,RF模型表现更好($R^2 > 0.93$)。

在吸附领域,生物炭的物理结构性质,包括表面积和孔隙体积,在气体吸附和污染物去除等应

用中至关重要^[4]。SHEN等^[57]通过RF和梯度提升回归模型(GBR)模型对生物炭的重金属吸附性能进行预测,后续还通过吸附实验证明了模型的可靠性($R^2 = 0.93$)。生物炭还应用于水环境中吸附新兴污染物,ZHANG等^[74]将挥发性有机物以RDKit分子指纹描述符作为模型输出,评估了52种生物炭,高磷含量的生物炭更具吸附潜力。因此,在元素组分调控的基础上,进一步区分磷含量与磷形态以完善催化剂改性方式,可拓展生物炭对新型污染物吸附的应用潜力。

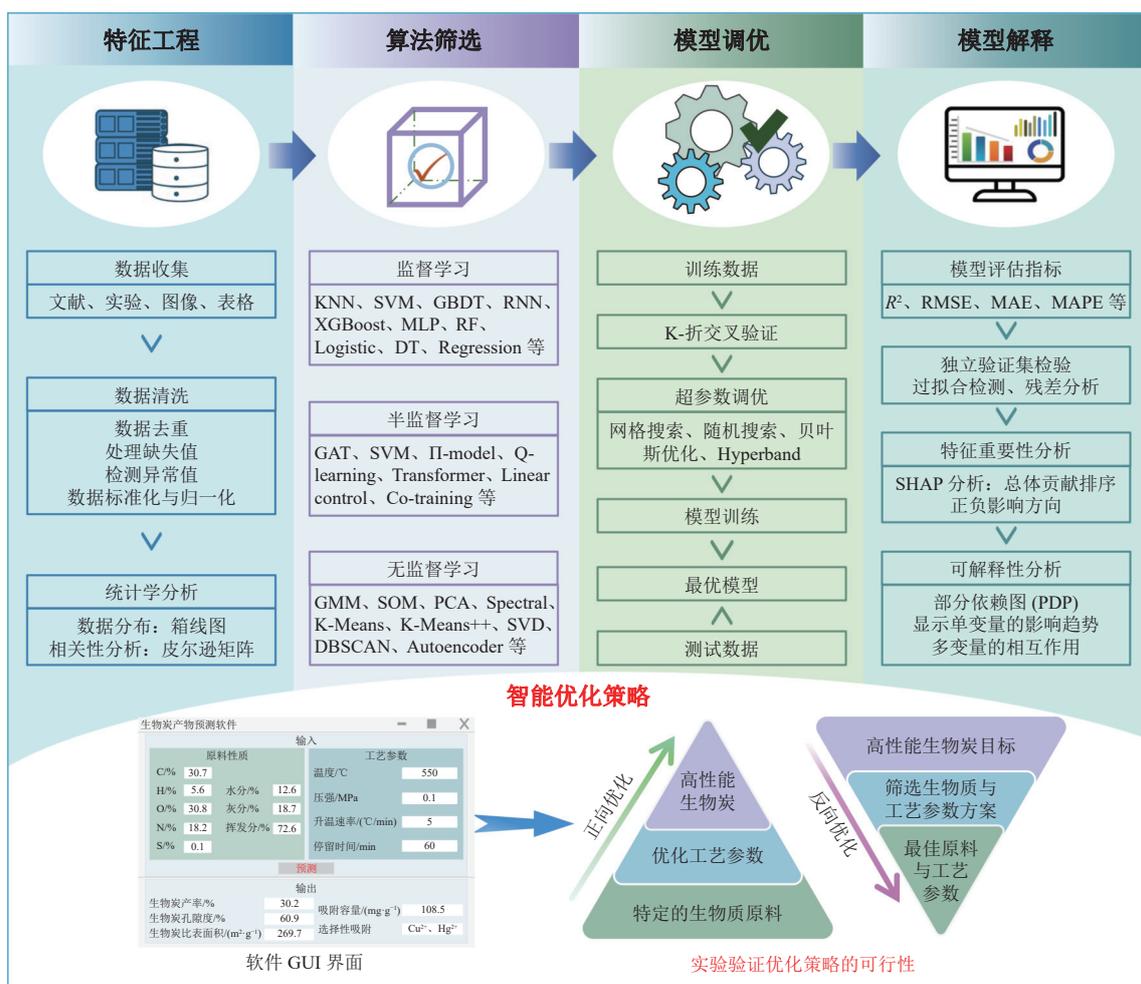
在催化与环境交叉领域,WANG等^[75]通过机器学习利用过氧单硫酸盐催化的生物炭联合先进氧化工艺实现了对新型污染物降解反应速率常数的预测,并且针对不同新污染物的降解模式,提供了优化策略。然而,模型输出应从单一目标扩展为多目标指标,例如副产物风险与去除成本,从而真正支撑工艺决策。

生物炭可作为新型的储能碳材料。WICKRAMAARACHCHI等^[76]利用生物质废料通过KOH活化生产可持续的超级电容器材料,随后利用包括DT、MLP和SVR在内的机器学习模型在非平衡条件下为系统建立相关性,预测了所生产的活性炭样品的能量储存性能。生物炭还可作为衍生硬碳阳极材料,LIU等^[77]将生物炭结构描述符与电流密度结合预测电化学性能(电容、初始库伦效率、储钠能力等)。面向器件的工程应用需要把材料预测与电极制备、测试条件及循环寿命耦合起来,构建跨尺度的多模态数据与多任务模型。

总体而言,机器学习正在推动生物炭从经验驱动走向数据与机制协同驱动(图3)。下一阶段的研究重点应从分散的单点预测,转向标准变量体系下的可解释建模、不确定性约束优化、多模态数据与多任务模型,使模型不仅能复现文献结果,还能在真实工程条件下指导原料筛选和工艺控制与应用场景匹配。

4 机器学习驱动生物炭智能设计

传统生物炭研发通常遵循“原料选择-工艺设定-材料制备-性能测试”的线性流程,在原料多样性和工艺参数高度耦合的条件下,往往需要大量试错实验才能获得满足特定应用需求的材料。这种经验驱动模式在实验尺度上可行,但在面对多原料、多工艺与多性能目标并存的复杂体系时,难以实现高效优化和可重复设计^[78]。



注: GBDT: 梯度提升决策树; RNN: 循环神经网络; Logistic: 逻辑回归; π -model: π 模型; Q-learning: Q 学习; Linear control: 线性控制; Co-training: 协同训练; SOM: 自组织映射; Spectral: 谱聚类; SVD: 奇异值分解; DBSCAN: 基于密度的空间聚类。

图 3 机器学习模型建立及生物炭优化策略

Fig. 3 Machine learning model construction and biochar optimization strategies

在机器学习框架下, 生物炭智能设计的基本思想是用数据驱动模型近似“原料、工艺到结构与性能”的映射关系。生物炭智能设计可归纳为 2 类核心问题: 正向预测与筛选优化以及反向设计与全局优化(图 3)。

正向预测与筛选优化以给定的原料与工艺条件为输入, 以生物炭结构或性能为输出。其流程: (1) 明确应用目标与输出指标(如吸附容量、热值、孔结构参数等); (2) 建立变量体系并采集数据, 覆盖原料端(元素组成、生化组成、工业分析等)与工艺端(温度、停留时间、气氛、升温速率、活化剂剂量等); (3) 数据清洗与缺失处理; (4) 训练并验证模型, 采用分组交叉验证避免数据泄露; (5) 用 SHAP 和不确定性输出解析主导因素, 形成候选方案排序与优先实验清单, 实现低成本缩小实验空间。

反向设计与全局优化以目标性能为起点, 反推原料与工艺组合, 解决实现目标性能应如何制备的问题。其流程: (1) 定义目标函数, 可为单目标或多目标(技术、经济、环境等); (2) 构建可用于优化的模型; (3) 设定搜索空间, 区分连续变量(温度、时间、剂量等)与离散变量(气氛、活化剂类型、路线选择等); (4) 采用贝叶斯优化、遗传算法等进行全局搜索, 得到最优解; (5) 对候选解进行可信域与可制造性筛查, 开展关键实验验证, 最终输出可执行的决策依据。

前者侧重于在给定原料描述符和制备条件的情况下去预测生物炭结构或性能, 用于快速缩小实验空间; 后者则以应用性能为出发点, 通过优化算法反推所需的生物质原料性质及其对应的工艺制备参数与路径^[79-80]。

基于上述范式, LI 等^[81] 利用混合机器学习框

架将制备端模型与吸附性能预测耦合,通过优化算法反推满足抗生素去除性能要求的工艺条件,其设计的生物炭在实验中表现出预期的高吸附性能。生物炭智能设计并非简单的性能拟合,而是一套可执行的方法体系,即以正向模型建立可解释映射,以反向优化实现目标导向搜索,并通过实验闭环验证,逐步从概念验证走向应用导向的工程优化。

4.1 生物质原料筛选

生物质原料是生物炭智能设计的起点,机器学习为原料选择提供了系统化手段。通常以元素组成、工业分析指标及生化组成作为输入特征,构建监督学习模型以量化原料差异对最终产物结构性质和应用性能的影响。例如,LI等^[82]基于生物炭结构性质预测模型,实现了6种生物质生物炭产率、比表面积和总孔隙体积的同步优化。进一步,有研究将生化组成纳入模型输入,揭示纤维素、半纤维素和木质素比例对孔结构形成和碳含量的差异化作用,并发现木质素的芳香化学键可以形成碳纳米片,为生物炭提供坚固的结构^[83]。机器学习将原料选择从经验判断转化为可计算的筛选问题,推动了生物炭智能设计。

4.2 碳化工艺设计

生物炭制备过程涉及热解温度、升温速率、停留时间、气氛类型及活化或改性条件等多个连续或离散参数,其对生物炭结构与性能的影响呈现高度非线性影响。LENG等^[84]利用RF和GBR模型实现了生物炭的产量、氮含量和比表面积的同时预测,热解条件(反应温度和停留时间)被认为是主要因素,尤其是热解温度与比表面积呈现正相关,通过模型的正向优化,可得到各生物质的最佳碳化条件。热解温度是影响生物炭应用性能最为关键的碳化工艺参数,THIRUVENGADAM等^[85]使用XGBoost模型推算出了目标吸附能力所需的最佳热解条件。YANG等^[86]将贝叶斯优化应用于生物炭制备条件调控,在显著减少实验次数的同时获得了更优的孔结构和吸附性能,验证了数据驱动优化在复杂工艺体系中的有效性。提高热解温度可提升生物炭的比表面积和吸附能力,但会降低生物炭产率,可通过构建多目标函数获得帕累托最优解集,为平衡不同应用需求提供灵活的工艺选择^[87]。

4.3 生物炭应用性能导向

生物炭应用性能的设计需要同时实现生物质

原料的筛选和碳化工艺的优化。通过生物炭材料结构性质预测模型,可确定生物质原料和碳化工艺参数对生物炭结构性能的影响规律。生物炭应用性能的预测模型则可揭示不同生物炭结构性质与应用性能的构效关系。联合“原料特征-工艺条件-结构性质”和“结构性质-应用性能”可实现生物炭应用性能的智能设计。例如,LI等^[81]第一步利用生物质的原料特征与热解条件作为输入,构建机器学习模型,预测生物炭的比表面积和总体积;第二步基于预测所得的结构特征(比表面积、总体积),建立吸附性能预测模型,实现对生物炭去除有机污染物的准确定量预测。

近期,研究者实现了生物炭结构性质预测模型和应用性能预测模型的融合,建立的“原料特征-工艺条件-应用性能”机器学习模型可直接基于应用性能反馈生物质原料的筛选和碳化工艺的优化。例如,AI等^[88]构建了一个结合生物炭孔隙率和CO₂吸附容量预测的耦合模型,仅需要生物质的元素和工业分析即可预测CO₂吸附容量,并基于验证后的模型进行生物质筛选和正向工艺优化,制备出了CO₂吸附量最高可达约5 mmol/g的花生壳生物炭。LENG等^[89]实现了生物质热解生物炭的阳离子交换能力的准确预测,建立的“原料特征-工艺条件-重金属吸附能力”机器学习模型筛选出秸秆原料进行热解碳化,优化制备的生物炭镉离子吸附量高达0.64 mmol/g。

先进算法如主动学习策略,使生物炭设计从静态建模迈向动态演化。YUAN等^[90]提出的主动学习驱动合成策略通过数据-实验循环优化,使用粒子群优化等算法推荐实验条件,使最终生物炭的CO₂吸附量在三轮实验中显著提升,展示了闭环智能设计降低实验成本、加速材料发现的潜力。这类研究表明机器学习不仅是分析工具,还可作为决策引擎直接参与材料设计过程。

4.4 融合技术经济分析和生命周期评价的全局优化

在机器学习驱动下,生物炭的研发实现了从单一性能优化到“技术-经济-环境”的全局协同跨越。传统方法往往陷入三者难以兼得的困境,而机器学习通过构建技术参数为输入的多目标性能预测模型,可耦合生命周期评估和经济分析模型,并以优化算法实现快速迭代^[91-92]。CHENG等^[92]通过机器学习方法、生命周期评估和经济分析的集成,评估了多种原料在不同热解条件下的能源、气候变化和经济表现。在机器学习模型取得良好

预测性能后,生命周期和经济分析显示,原料特性和热解温度会显著影响能源、气候变化和经济性,其中作物残渣和木质废弃物进行缓慢热解具有较优的负排放潜力。通过训练代理模型,系统能够快速预测不同设计方案(如原料、工艺参数)所对应的性能指标、环境影响(如碳足迹)和经济成本^[93]。在此基础上,采用多目标优化算法,同时以最小化环境负荷、最大化技术效用和经济效益为目标进行全局搜索,为生物炭智能设计从实验室研究走向工程应用奠定了方法基础。

5 未来展望、挑战与结论

为推动机器学习在生物炭工程中的应用,未来研究需要在数据、模型与工程应用三个层面协同突破。

5.1 数据层面

生物炭相关描述符数据的测试方法存在差异和不可比性,是制约机器学习模型可靠性的核心因素。即使针对相同类型的生物质原料,不同来源及预处理方式会导致元素组成、灰分和结构特征显著差异;同时,不同的研究中对热解或水热工艺条件的定义和控制方式不统一,使得数据在整合时存在系统性偏差。此外,大量文献数据存在关键变量缺失、数据模糊以及实验筛选过程不透明等问题,进一步降低了数据的可复用性。这些因素共同限制了机器学习模型在新原料和新工况下的泛化能力。

5.2 模型层面

当前高性能机器学习模型普遍存在可解释性不足的问题,其预测结果有时可能与生物炭形成过程中的基本物理化学规律相矛盾。在小样本、高噪声的数据条件下,模型容易捕捉统计相关性而忽略真实机理,从而在新原料或新工况下产生不可控的预测偏差。这种“黑箱化”特征在工程决策场景中具有潜在风险,可能误导工艺优化方向。因此,亟须发展将物理约束、机理变量或经验规律显式引入模型结构的物理信息融合机器学习方法,以提升模型预测的可信度和可推广性。

5.3 工程应用层面

机器学习模型从虚拟材料设计到实际工程放大之间仍存在显著鸿沟。实验室条件下获得的最优材料或工艺方案,在规模化生产中往往受原料波动、传热传质受限以及经济性约束等多重因素影响而难以直接复现。现有机器学习模型多基于

理想化或稳态假设,尚难以与过程模拟和工程约束条件有效耦合。未来有必要发展能够联通微观材料特性、反应动力学与宏观工程的跨尺度建模与优化平台,以提升机器学习在生物炭工程应用中的实用价值。

5.4 结论

(1)机器学习为生物质制备生物炭提供了从经验驱动向数据驱动转变的有效路径。

(2)通过构建“原料特征-工艺条件-结构性质-应用性能”之间的定量关联,机器学习能够实现生物炭性能预测、调控工艺参数与正向和反向优化策略,加速高性能生物炭的定向制备。

(3)随着高质量数据积累、多模态信息融合及先进算法的发展,机器学习有望进一步推动生物炭制备的智能化、可控化与工程化应用。

参考文献 (References):

- [1] SEO M W, LEE S H, NAM H, et al. Recent advances of thermochemical conversion processes for biorefinery[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 343: 126109.
- [2] 魏静, 邓敏, 银登国, 等. “双碳”背景下钢铁行业 CO₂ 捕集研究进展 [J]. *能源环境保护*, 2025, 39(4): 1-13.
WEI Jing, DENG Min, YIN Dengguo, et al. Research progress on CO₂ capture in the steel industry under the dual carbon background[J]. *Energy Environmental Protection*, 2025, 39(4): 1-13.
- [3] WANG H S, YAO Yuan. Machine learning for sustainable development and applications of biomass and biomass-derived carbonaceous materials in water and agricultural systems: A review[J]. *Resources, Conservation and Recycling*, 2023, 190: 106847.
- [4] WANG Wei, CHANG J S, LEE D J. Machine learning applications for biochar studies: A mini-review[J]. *Bioresource Technology*, 2024, 394: 130291.
- [5] UKOBA K, JEN T C. Biochar and application of machine learning: A review[M]//Biochar-Productive Technologies, Properties and Applications. London: IntechOpen, 2023.
- [6] WAN Zhonghao, SUN Yuqing, TSANG D C W, et al. Customised fabrication of nitrogen-doped biochar for environmental and energy applications[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2020, 401: 126136.
- [7] GAO Pin, YAO Ducheng, QIAN Yajie, et al. Factors controlling the formation of persistent free radicals in hydrochar during hydrothermal conversion of rice straw[J]. *Environmental Chemistry Letters*, 2018, 16(4): 1463-1468.
- [8] TRIPATHI M, SAHU J N, GANESAN P. Effect of process parameters on production of biochar from biomass waste through pyrolysis: A review[J]. *Renewable and Sustainable*

- [Energy Reviews](#), 2016, 55: 467–481.
- [9] WANG Jianlong, WANG Shizong. Preparation, modification and environmental application of biochar: A review[J]. [Journal of Cleaner Production](#), 2019, 227: 1002–1022.
- [10] YANG Mingtong, DU Yunchen, TONG Waichi, et al. Cobalt-impregnated biochar produced from CO₂-mediated pyrolysis of Co/lignin as an enhanced catalyst for activating peroxymonosulfate to degrade acetaminophen[J]. [Chemosphere](#), 2019, 226: 924–933.
- [11] PALANSOORIYA K N, OK Y S, AWAD Y M, et al. Impacts of biochar application on upland agriculture: A review[J]. [Journal of Environmental Management](#), 2019, 234: 52–64.
- [12] LOC N X, PHUONG D T M. Optimizing biochar production: A review of recent progress in lignocellulosic biomass pyrolysis[J]. [Frontiers of Agricultural Science and Engineering](#), 2025, 12(1): 148–172.
- [13] LI Lidong, LONG A, FOSSUM B, et al. Effects of pyrolysis temperature and feedstock type on biochar characteristics pertinent to soil carbon and soil health: A meta-analysis[J]. [Soil Use and Management](#), 2023, 39(1): 43–52.
- [14] SANTOS D C B D, EVARISTO R B W, DUTRA R C, et al. Advancing biochar applications: A review of production processes, analytical methods, decision criteria, and pathways for scalability and certification[J]. [Sustainability](#), 2025, 17(6): 2685.
- [15] TRUBETSKAYA A, JENSEN P A, JENSEN A D, et al. Influence of fast pyrolysis conditions on yield and structural transformation of biomass chars[J]. [Fuel Processing Technology](#), 2015, 140: 205–214.
- [16] KIVIJAKOLA J, RÖNKKÖ P, ROININEN J, et al. Feasibility of biocarbon in steel production-challenges and benefits of value chain[J]. [Carbon Management](#), 2025, 16(1): 2574984.
- [17] 杨佳林, 孟仕浩, 韩博宇, 等. 烟草废弃物衍生炭材料的热化学制备与吸附机制研究进展 [J]. [能源环境保护](#), 2025, 39(5): 79–92.
YANG Jialin, MENG Shihao, HAN Boyu, et al. Advances in thermo-chemical preparation and adsorption mechanisms of carbon materials derived from tobacco wastes[J]. [Energy Environmental Protection](#), 2025, 39(5): 79–92.
- [18] YUAN Jinhua, XU Renkou, WANG Ning, et al. Amendment of acid soils with crop residues and biochars[J]. [Pedosphere](#), 2011, 21(3): 302–308.
- [19] YUAN Jinhua, XU Renkou. The amelioration effects of low temperature biochar generated from nine crop residues on an acidic Ultisol[J]. [Soil Use and Management](#), 2011, 27(1): 110–115.
- [20] MUKHERJEE A, LAL R. The biochar dilemma[J]. [Soil Research](#), 2014, 52(3): 217–230.
- [21] DING Zhuhong, WAN Yongshang, HU Xin, et al. Sorption of lead and methylene blue onto hickory biochars from different pyrolysis temperatures: Importance of physicochemical properties[J]. [Journal of Industrial and Engineering Chemistry](#), 2016, 37: 261–267.
- [22] PARK S, JUNG E Y, KIM S H, et al. Enhancement of film cooling effectiveness using backward injection holes[J]. [International Journal of Thermal Sciences](#), 2016, 110: 314–324.
- [23] CHO H J, BAEK K, JEON J K, et al. Removal characteristics of copper by marine macro-algae-derived chars[J]. [Chemical Engineering Journal](#), 2013, 217: 205–211.
- [24] SHIM T, YOO J, RYU C, et al. Effect of steam activation of biochar produced from a giant Miscanthus on copper sorption and toxicity[J]. [Bioresource Technology](#), 2015, 197: 85–90.
- [25] XU Xiaoyun, CAO Xinde, ZHAO Ling. Comparison of rice husk- and dairy manure-derived biochars for simultaneously removing heavy metals from aqueous solutions: Role of mineral components in biochars[J]. [Chemosphere](#), 2013, 92(8): 955–961.
- [26] LIU Pei, LIU Wujun, JIANG Hong, et al. Modification of bio-char derived from fast pyrolysis of biomass and its application in removal of tetracycline from aqueous solution[J]. [Bioresource Technology](#), 2012, 121: 235–240.
- [27] MUBARIK S, SAEED A, ATHAR M M, et al. Characterization and mechanism of the adsorptive removal of 2, 4, 6-trichlorophenol by biochar prepared from sugarcane baggase[J]. [Journal of Industrial and Engineering Chemistry](#), 2016, 33: 115–121.
- [28] HUANG Y F, CHIUEH P T, SHIH C H, et al. Microwave pyrolysis of rice straw to produce biochar as an adsorbent for CO₂ capture[J]. [Energy](#), 2015, 84: 75–82.
- [29] QIAN Kezhen, KUMAR A, ZHANG Hailin, et al. Recent advances in utilization of biochar[J]. [Renewable and Sustainable Energy Reviews](#), 2015, 42: 1055–1064.
- [30] SHEN Yafei, ZHAO Peitao, SHAO Qinfu, et al. In-situ catalytic conversion of tar using rice husk char-supported nickel-iron catalysts for biomass pyrolysis/gasification[J]. [Applied Catalysis B: Environmental](#), 2014, 152: 140–151.
- [31] HAO Wenming, BJÖRKMANN E, LILLIESTRÅLE M, et al. Activated carbons prepared from hydrothermally carbonized waste biomass used as adsorbents for CO₂[J]. [Applied Energy](#), 2013, 112: 526–532.
- [32] DEHKHODA A M, WEST A H, ELLIS N. Biochar based solid acid catalyst for biodiesel production[J]. [Applied Catalysis A: General](#), 2010, 382(2): 197–204.
- [33] YAN Qiangu, WAN Caixia, LIU Jian, et al. Iron nanoparticles in situ encapsulated in biochar-based carbon as an effective catalyst for the conversion of biomass-derived syngas to liquid hydrocarbons[J]. [Green Chemistry](#), 2013, 15(6):

- 1631–1640.
- [34] SHEN Boxiong, CHEN Jianhong, YUE Shiji, et al. A comparative study of modified cotton biochar and activated carbon based catalysts in low temperature SCR[J]. *Fuel*, 2015, 156: 47–53.
- [35] KO J H, KWAK Y H, YOO K S, et al. Selective catalytic reduction of NO_x using RDF char and municipal solid waste char based catalyst[J]. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, 2011, 13(3): 173–179.
- [36] WANG Kai, LIN Minghong, CIUCU F, et al. Characterizing the impact of the workload on the value of dynamic resizing in data centers[J]. *Performance Evaluation*, 2015, 85: 1–18.
- [37] ABIOYE A M, ANI F N. Recent development in the production of activated carbon electrodes from agricultural waste biomass for supercapacitors: A review[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, 52: 1282–1293.
- [38] JIA Hailang, CHAI Keyang, JI Pengcheng, et al. High capacity peanut shell-based hard carbon as a negative electrode for sodium-ion batteries[J]. *Sustainable Energy & Fuels*, 2025, 9(7): 1822–1828.
- [39] CHOI Y J, LEE Y, KIM K M, et al. Higher free thyroxine levels are associated with sarcopenia in elderly Koreans[J]. *Osteoporosis and Sarcopenia*, 2015, 1(2): 127–133.
- [40] 张子杭, 邢博, 马中青, 等. 多源有机固废热解特性研究与预测分析 [J]. *能源环境保护*, 2024, 38(5): 135–146. ZHANG Zihang, XING Bo, MA Zhongqing, et al. Research and predictive analysis of pyrolysis characteristics of multi-source organic solid wastes[J]. *Energy Environmental Protection*, 2024, 38(5): 135–146.
- [41] GAO Jiaxin, ZHANG Weijin, LENG Lijian, et al. A novel clustering-regression machine learning framework for biomass classification and biochemical composition prediction from elemental composition[J]. *Bioresource Technology*, 2026, 444: 133954.
- [42] LENG Lijian, GAO Jiaxin, ZHANG Weijin, et al. Machine-learning-aided prediction of the building block profiles of lignocellulosic biomass using elemental composition[J]. *Biomass and Bioenergy*, 2026, 205: 108531.
- [43] LENG Lijian, LI Tanghao, GAO Jiaxin, et al. Machine-learning-aided prediction of the biological compositions and building block profiles of biomass using only their elemental compositions[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 507: 160512.
- [44] CHA Jinsun, PARK S H, JUNG S C, et al. Production and utilization of biochar: A review[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2016, 40: 1–15.
- [45] HEIDARI A, STAHL R, YOUNESI H, et al. Effect of process conditions on product yield and composition of fast pyrolysis of eucalyptus grandis in fluidized bed reactor[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2014, 20(4): 2594–2602.
- [46] SHAFAGHAT H, REZAEI P S, DAUD W M A W. Catalytic hydrodeoxygenation of simulated phenolic bio-oil to cycloalkanes and aromatic hydrocarbons over bifunctional metal/acid catalysts of Ni/HBeta, Fe/HBeta and NiFe/HBeta[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2016, 35: 268–276.
- [47] AHMAD M, LEE S S, DOU Xiaomin, et al. Effects of pyrolysis temperature on soybean stover- and peanut shell-derived biochar properties and TCE adsorption in water[J]. *Bioresource Technology*, 2012, 118: 536–544.
- [48] KELEŞ S, KAYGUSUZ K, AKGÜN M. Pyrolysis of woody biomass for sustainable bio-oil[J]. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2011, 33(9): 879–889.
- [49] 唐雨菲, 宋佳诚, 郭宇航, 等. 有机固废制备生物炭材料及应用 [J]. *能源环境保护*, 2025, 39(3): 27–39. TANG Yufei, SONG Jiacheng, GUO Yuhang, et al. Preparation and applications of biochar materials from organic solid waste[J]. *Energy Environmental Protection*, 2025, 39(3): 27–39.
- [50] ZHANG Yaning, FAN Sichen, LIU Tao, et al. A review of biochar prepared by microwave-assisted pyrolysis of organic wastes[J]. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 2022, 50: 101873.
- [51] MAMVURA T A, DANHA G. Biomass torrefaction as an emerging technology to aid in energy production[J]. *Heliyon*, 2020, 6(3): e03531.
- [52] ZHANG Weijin, ZHOU Junhui, LIU Qian, et al. A novel intelligent system based on machine learning for hydrochar multi-target prediction from the hydrothermal carbonization of biomass[J]. *Biochar*, 2024, 6(1): 19.
- [53] MEYER S, GLASER B, QUICKER P. Technical, economical, and climate-related aspects of biochar production technologies: A literature review[J]. *Environmental Science & Technology*, 2011, 45(22): 9473–9483.
- [54] QIAN Kezhen, KUMAR A, PATIL K, et al. Effects of biomass feedstocks and gasification conditions on the physicochemical properties of char[J]. *Energies*, 2013, 6(8): 3972–3986.
- [55] CHEAH S, MALONE S C, FEIK C J. Speciation of sulfur in biochar produced from pyrolysis and gasification of oak and corn stover[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48(15): 8474–8480.
- [56] LENG Lijian, LIU Renfeng, XU Siyu, et al. An overview of sulfur-functional groups in biochar from pyrolysis of biomass[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2022, 10(2): 107185.
- [57] SHEN Tian, PENG Haoyi, YUAN Xingzhong, et al. Feature engineering for improved machine-learning-aided studying heavy metal adsorption on biochar[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2024, 466: 133442.

- [58] BREWER C E, CHUANG V J, MASIELLO C A, et al. New approaches to measuring biochar density and porosity[J]. *Biomass and Bioenergy*, 2014, 66: 176–185.
- [59] JAAFAR N M, CLODE P L, ABBOTT L K. Soil microbial responses to biochars varying in particle size, surface and pore properties[J]. *Pedosphere*, 2015, 25(5) : 770–780.
- [60] MIMMO T, PANZACCHI P, BARATIERI M, et al. Effect of pyrolysis temperature on miscanthus (*Miscanthus × giganteus*) biochar physical, chemical and functional properties[J]. *Biomass and Bioenergy*, 2014, 62: 149–157.
- [61] 张霄, 董毅, 林赛赛, 等. 机器学习加速能源环境催化材料的创新研究 [J]. *能源环境保护*, 2023, 37(3): 1–12.
ZHANG Xiao, DONG Yi, LIN Saisai, et al. Machine learning accelerating innovative researches on energy and environmental catalysts[J]. *Energy Environmental Protection*, 2023, 37(3): 1–12.
- [62] JIANG Junhua, ZHANG Lei, WANG Xinying, et al. Highly ordered macroporous woody biochar with ultra-high carbon content as supercapacitor electrodes[J]. *Electrochimica Acta*, 2013, 113: 481–489.
- [63] IGALAVITHANA A D, MANDAL S, NIAZI N K, et al. Advances and future directions of biochar characterization methods and applications[J]. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 2017, 47(23): 2275–2330.
- [64] ZHANG Weijin, LI Jie, LIU Tonggui, et al. Machine learning prediction and optimization of bio-oil production from hydrothermal liquefaction of algae[J]. *Bioresource Technology*, 2021, 342: 126011.
- [65] LENG Lijian, ZHANG Weijin, LIU Tonggui, et al. Machine learning predicting wastewater properties of the aqueous phase derived from hydrothermal treatment of biomass[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 358: 127348.
- [66] GOLDSTEIN A, KAPELNER A, BLEICH J, et al. Peeking inside the black box: Visualizing statistical learning with plots of individual conditional expectation[J]. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 2015, 24(1) : 44–65.
- [67] ZHU Xinzhe, LI Yinan, WANG Xiaonan. Machine learning prediction of biochar yield and carbon contents in biochar based on biomass characteristics and pyrolysis conditions[J]. *Bioresource Technology*, 2019, 288: 121527.
- [68] HAQ Z U, ULLAH H, KHAN M N A, et al. Comparative study of machine learning methods integrated with genetic algorithm and particle swarm optimization for bio-char yield prediction[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 363: 128008.
- [69] LI Yize, GUPTA R, YOU Siming. Machine learning assisted prediction of biochar yield and composition via pyrolysis of biomass[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 359: 127511.
- [70] SHAHBEIK H, RAFIEE S, SHAFIZADEH A, et al. Characterizing sludge pyrolysis by machine learning: Towards sustainable bioenergy production from wastes[J]. *Renewable Energy*, 2022, 199: 1078–1092.
- [71] PAN Ganggang, DONG Haoyan, NOURODDIN M K. Applying ANFIS and LSSVM models for the estimation of biochar aromaticity[J]. *International Journal of Chemical Engineering*, 2022, 2022(1): 5639203.
- [72] MARI SELVAM S, BALASUBRAMANIAN P. Influence of biomass composition and microwave pyrolysis conditions on biochar yield and its properties: A machine learning approach[J]. *BioEnergy Research*, 2023, 16(1): 138–150.
- [73] JIANG Wen, XING Xianjun, ZHANG Xianwen, et al. Prediction of combustion activation energy of NaOH/KOH catalyzed straw pyrolytic carbon based on machine learning[J]. *Renewable Energy*, 2019, 130: 1216–1225.
- [74] ZHANG Weijin, CHEN Qingyue, GENG Jiarong, et al. Predicting adsorption of volatile organic compounds onto biochars with machine learning and potential applications[J]. *ACS ES&T Engineering*, 2025, 5(12): 3326–3336.
- [75] WANG Rupeng, CHEN Honglin, HE Zixiang, et al. Discovery of an end-to-end pattern for contaminant-oriented advanced oxidation processes catalyzed by biochar with explainable machine learning[J]. *Environmental Science & Technology*, 2024, 58(38): 16867–16876.
- [76] WICKRAMAARACHCHI W A M K P, MINAKSHI M, GAO Xiangpeng, et al. Hierarchical porous carbon from mango seed husk for electro-chemical energy storage[J]. *Chemical Engineering Journal Advances*, 2021, 8: 100158.
- [77] LIU Muxin, TANG Quan, LENG Erwei, et al. Multi-staged machine learning-driven investigation of biomass-derived hard carbon anodes for sodium-ion batteries: Connecting precursor, structure, and performance[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2026, 528: 172350.
- [78] JOHANNES LEHMANN S J. *Biochar for Environmental Management*[M]. London: Routledge, 2015.
- [79] BUTLER K T, DAVIES D W, CARTWRIGHT H, et al. Machine learning for molecular and materials science[J]. *Nature*, 2018, 559(7715): 547–555.
- [80] SUN Xiaotong, LI Ruili, ZHANG Bowen, et al. Function–structure–synthesis: Machine learning enabled closed-loop design of biomass-derived porous carbon materials[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2025, 13(21): 7698–7709.
- [81] LI Jie, PAN Lanjia, HUANG Yahui, et al. Biochar design for antibiotics adsorption via a hybrid machine-learning-based optimization framework[J]. *Separation and Purification Technology*, 2024, 348: 127666.
- [82] LI Hailong, AI Zejian, YANG Lihong, et al. Machine learning assisted predicting and engineering specific surface area and total pore volume of biochar[J]. *Bioresource Technology*, 2023, 369: 128417.

- [83] DENG Jiang, XIONG Tianyi, WANG Haiyan, et al. Effects of cellulose, hemicellulose, and lignin on the structure and morphology of porous carbons[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2016, 4(7): 3750–3756.
- [84] LENG Lijian, YANG Lihong, LEI Xinni, et al. Machine learning predicting and engineering the yield, N content, and specific surface area of biochar derived from pyrolysis of biomass[J]. *Biochar*, 2022, 4(1): 63.
- [85] THIRUVENGADAM S, EDMUND MURPHY M, TAN J S. Mathematically modelling pyrolytic polygeneration processes using artificial intelligence[J]. *Fuel*, 2021, 295: 120488.
- [86] YANG Hongwei, LIU Xiangrong, LIU Yingliang, et al. Revolutionizing biochar synthesis for enhanced heavy metal adsorption: Harnessing machine learning and Bayesian optimization[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2023, 11(5): 110593.
- [87] AYOOLA R B, ILORI O M, AMIDU S A, et al. Optimization of production process of agro-based activated carbon for sustainable cooling systems[J]. *Next Research*, 2026, 3: 101132.
- [88] AI Zejian, CAO Chengkai, ZHANG Weijin, et al. Machine learning-aided engineering of biochar from biomass pyrolysis and activation processes for enhanced CO₂ adsorption[J]. *Separation and Purification Technology*, 2025, 376: 133882.
- [89] LENG Lijian, ZHENG Huihui, SHEN Tian, et al. Engineering biochar from biomass pyrolysis for effective adsorption of heavy metal: An innovative machine learning approach[J]. *Separation and Purification Technology*, 2025, 361: 131592.
- [90] YUAN Xiangzhou, SUVARNA M, LIM J Y, et al. Active learning-based guided synthesis of engineered biochar for CO₂ capture[J]. *Environmental Science & Technology*, 2024, 58(15): 6628–6636.
- [91] LIAO Mochen, KELLEY S, YAO Yuan. Generating energy and greenhouse gas inventory data of activated carbon production using machine learning and kinetic based process simulation[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2020, 8(2): 1252–1261.
- [92] CHENG Fangwei, LUO Hongxi, COLOSI L M. Slow pyrolysis as a platform for negative emissions technology: An integration of machine learning models, life cycle assessment, and economic analysis[J]. *Energy Conversion and Management*, 2020, 223: 113258.
- [93] ZHOU Junhui, CHEN Jiefeng, ZHANG Weijin, et al. Machine-learning-aided life cycle assessment and techno-economic analysis of hydrothermal liquefaction of sewage sludge for bio-oil production[J]. *Energy*, 2025, 319: 135026.