

DOI: 10.11835/j.issn.2096-6717.2023.060



开放科学(资源服务)标识码 OSID:



基于机器学习的多孔生物炭吸附 CO₂ 性能预测

陈一飞¹, 张晓晴¹, 谭康豪^{1,2}, 汪俊松², 覃英宏¹

(1. 广西大学 土木建筑工程学院; 工程防灾与结构安全教育部重点实验室, 南宁 530004;
2. 华南理工大学 亚热带建筑科学国家重点实验室, 广州 510640)

摘要: CO₂ 的捕集与封存(CCS)是一种潜力巨大的减排措施。多孔生物炭含有丰富的多尺度孔隙结构, 具有优异的CO₂ 吸附性能。针对传统基于试验数据建立的CO₂ 吸附预测模型存在的精度低、计算复杂等不足, 采用梯度提升决策树(GBDT)、极端梯度增强算法(XGB)、轻型梯度增压机算法(LGBM)等机器学习方法对生物炭吸附CO₂ 进行模型预测, 并对预测结果进行对比分析。结果表明: 影响CO₂ 吸附量的前3个因素依次为生物炭的比表面积、C含量、O含量。3种算法均能有效预测生物炭对CO₂ 的吸附性能。相比之下, LGBM的预测精度最高, 达到94%; GBDT在异常样本数据处理方面有显著优势; 而XGB对不同测试集变化的预测结果更加稳定。在设计生物炭吸附性能时, 不应盲目追求过高的表面积。建议生物炭C含量优先选择83%~88%之间, O含量优先选择15%~18%之间。

关键词: 生物炭; 机器学习; 二氧化碳吸附; 特征重要性; 部分依赖图

中图分类号: TU528.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 2096-6717(2025)03-0242-09

Prediction of CO₂ adsorption performance in porous biochar based on machine learning

CHEN Yifei¹, ZHANG Xiaoqing¹, TAN Kanghao^{1,2}, WANG Junsong², QIN Yinghong¹

(1. School of Civil Engineering and Architecture; Key Laboratory of Disaster Prevention and Engineering Safety of Guangxi, Guangxi University, Nanning 530004, P. R. China; 2. State Key Laboratory of Subtropical Building Science, South China University of Technology, Guangzhou 510640, P. R. China)

Abstract: CO₂ capture and sequestration (CCS) is an emission reduction measure with great potential. Porous biochar contains rich multi-scale pore structure, which makes it have excellent CO₂ adsorption performance. To address the shortcomings of traditional CO₂ adsorption prediction models built with experimental data, such as low accuracy and complicated calculation, this paper adopts machine learning methods such as gradient boosting decision tree (GBDT), extreme gradient enhancement algorithm (XGB) and light gradient booster algorithm (LGBM) to make model predictions of CO₂ adsorption by biochar, and conducts comparative analysis of the prediction results. The results showed that the three most important factors affecting CO₂ adsorption were the

收稿日期: 2022-12-03

基金项目: 广东省省级科技计划项目国际合作专项(2021A0505030008)

作者简介: 陈一飞(1997-), 男, 主要从事低碳建筑材料研究, E-mail: 1993795408@qq.com。

谭康豪(通信作者), 男, 博士, E-mail: haokangtan@163.com。

Received: 2022-12-03

Foundation item: Guangdong Provincial Science and Technology Program International Cooperation Special Project (2021A0505030008)

Author brief: CHEN Yifei (1997-), main research interest: low-carbon building materials, E-mail: 1993795408@qq.com.

TAN Kanghao (corresponding author), PhD, E-mail: haokangtan@163.com.

specific surface area, C content, and O content of biochar in order. All three algorithms could effectively predict the CO₂ adsorption performance of biochar. In comparison, LGBM has the highest prediction accuracy of 94%; GBDT has a significant advantage in processing anomalous sample data; and XGB has more stable prediction results for different test set variations. When designing the adsorption performance of biochar, excessive surface area should not be blindly pursued. It is recommended that the selection of biochar C content should preferably be between 83% and 88%, and O content should preferably be between 15% and 18%.

Keywords: biochar; machine learning; CO₂ adsorption; feature importance; partial dependency map

温室气体积累导致全球变暖,已经成为国际社会研究的热点问题^[1]。CO₂作为最常见的温室气体,每年的排放量在不断上升。根据全球碳排放组织发布的2020年年度分析报告,截至2020年,全球CO₂排放总量为520亿t,预计2050年全球大气中CO₂的质量浓度将达到898 mg/m³^[2]。控制CO₂排放的主要方法之一为CO₂捕集和封存(CCS),电力行业中燃煤发电排放量占总排放量的40%,是CCS技术应用的主要领域^[3]。作为CCS技术的第一步,CO₂捕集技术可以分为化学吸收、物理吸收、物理吸附、膜分离等方法^[4]。其中物理吸附具有成本低、操作简单、热和化学性质稳定、CO₂负载能力高等优点^[5]。近年来,多孔炭材料因独特的理化特性和高稳定性而被认为是一种非常有前景的高效材料,可用作低温CO₂固体吸附剂^[6]。目前,多孔生物炭材料的种类繁多,但对其用于CO₂吸附的机理鲜有研究。

生物炭对CO₂的吸附性能主要取决于生物质原料类型和炭化方法^[7-9]。例如,Cao等^[10]发现,木材生物炭的CO₂吸附容量在100 kPa下达到45.85 mg/g(25 °C)、41.23 mg/g(0 °C),主要受比表面积与碱度控制。Tiwari等^[11]使用低成本环氧树脂制备了KOH活性富氮多孔炭,其比表面积达4 547 m²/g,总孔隙体积达4.50 cm³/g,同时具有丰富的含O官能团和碱性官能团,促进了CO₂的吸附。此外,Yang等^[12]使用椰子壳制备了孔和高CO₂吸附能力的多孔炭,具有大量微发现微孔孔径对常压下CO₂的吸附性能有显著影响。上述研究表明,生物质多孔炭的制备技术已相对成熟,大部分生物质原料经过简单炭化和活化制备即可获得良好的CO₂吸附性能。但是,如何寻找理想的CO₂捕获材料仍然是一个巨大挑战。相较于传统的实验分析、理论计算和模拟等方法,应用机器学习筛选CO₂捕获材料正受到广泛关注^[13-14]。Abdi等^[15]使用轻型梯度增压机(LGBM)、极端梯度增强算法(XGB)、随机森林(RF)等算法预测了19种不同的金属有机框架对CO₂的吸附能力,发现XGB算法对预测CO₂吸附性

能最佳。类似地,Halalsheh等^[16]利用AdaBoost、XGB、LGBM、CatBoost算法预测了铁涂层天然沸石吸附金属离子的能力,结果表明,这4种算法对金属吸附均有良好的预测精度。Yuan等^[17]使用梯度提升决策树(GBDT)预测了多孔炭吸附CO₂的能力,得到训练集和测试集的R²分别为0.98和0.84。然而,不同的机器学习算法对于不同范围的数据集具有不同的敏感度,因此,需要针对特定的材料数据样本选择合适的算法,并使用相应的性能评估手段评价其优劣。

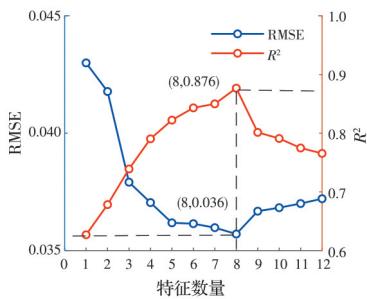
基于此,笔者分别采用GBDT、XGB、LGBM三种机器学习算法,建立生物炭对CO₂吸附性能的预测模型,评估各个预测模型的优劣和可靠性。

1 材料和方法

1.1 数据收集和处理

收集334个数据样本,并以此构建预测生物炭对CO₂吸附性能的数据模型。数据集包含不同原料类型,如甘蔗渣、竹子、松木、树皮、家禽垃圾、稻草等。原始数据收集过程中主要考虑生物炭的制备工艺和自身理化特性,包括热解温度P_t、热解速率、元素组成(C、H、O、N)、比表面积S_{BET}、总孔隙体积V_t、微孔体积V_m、CO₂吸附量A_c、激活温度、原料类型及pH值等13种特征值。由于原材料来源广泛,不易统计,且影响生物炭吸附CO₂性能的关键因素为孔隙特征与化学性质,故将原材料类型剔除。此外,数据集可能存在缺失值,当数据缺失率达70%以上,则会删除该参数属性。对于输入的生物炭自身参数,其中,激活温度、pH值数据都不足70%,从而排除在模型开发之外。对于其他部分数据缺失值,采用平均值替代,以保证数据的连续性^[18]。

图1所示为采用10倍交叉验证来寻找模型的最优特征值变量。由图1可见,特征值的输入变量最佳个数为8,即生物炭的元素组成与热解条件(P_t、S_{BET}、V_t、V_m、C、H、O、N)。表1给出了8种输入变量与输出变量的平均值、最大最小值及四分位数。可以看出,热解温度、比表面积、O元素特征变量标准

图1 不同特征组合下的均方根误差 RMSE、 R^2 变化趋势Fig. 1 Trends of root mean square error, R^2 for different combinations of features

差值较大,说明数据覆盖范围广,具有很高的泛化性能。不同的分位数则直观地反映了数据的集中情况,证明了数据的有效性。此外,图2进一步比较

了各个变量的直方图与核密度图,发现各个输入变量的特征均呈近似正态分布,而且各个变量的核密度分布均呈现出明显的波峰状,说明各个变量的数据集中密集,没有呈现多极分化的现象,从而提高了模型的普适性。

由于各个参数数值范围不同,采用数据标准化处理,得到符合标准的正态分布函数,以解决各个指标之间的可比性问题。其正态分布函数如式(1)所示。

$$Z_i = \frac{X_i - \rho}{\sigma} \quad (1)$$

式中: X_i 为原始数据; ρ 为所有样本的均值; σ 为所有样本的标准差。

表1 数据集数值型特征的统计描述

Table 1 Statistical description of numerical characteristics of data set

| 变量 | 特征 | 平均值 | SD | Min | $Q/4$ | $Q/2$ | $3Q/4$ | Max |
|-------|----------------------------|----------|---------|------|-------|---------|--------|-------|
| X_1 | 热解温度/°C | 654.04 | 149.36 | 300 | 600 | 700 | 800 | 1 000 |
| X_2 | 比表面积/(m ² /g) | 1 493.48 | 751.44 | 248 | 966 | 1 408.8 | 1 960 | 3 537 |
| X_3 | 总孔隙体积/(cm ³ /g) | 0.810 6 | 0.476 5 | 0.02 | 0.48 | 0.69 | 1.03 | 3.09 |
| X_4 | 微孔空隙/(cm ³ /g) | 0.545 1 | 0.297 7 | 0.04 | 0.33 | 0.49 | 0.73 | 1.87 |
| X_5 | C/% | 76.98 | 10.791 | 40.4 | 70.6 | 78.62 | 85.15 | 96.96 |
| X_6 | H/% | 2.048 | 1.180 2 | 0.04 | 1.17 | 1.97 | 2.58 | 6.01 |
| X_7 | O/% | 51.668 | 210.73 | 0.23 | 7.46 | 11.4 | 19.49 | 50.63 |
| X_8 | N/% | 3.641 5 | 3.045 9 | 0.01 | 1.35 | 2.75 | 5.05 | 15.88 |
| Y | CO_2 吸附量/(mmol/g) | 3.383 8 | 0.925 6 | 0.46 | 2.78 | 3.47 | 4.08 | 5.63 |

注:SD为标准差;Q为四分位数。

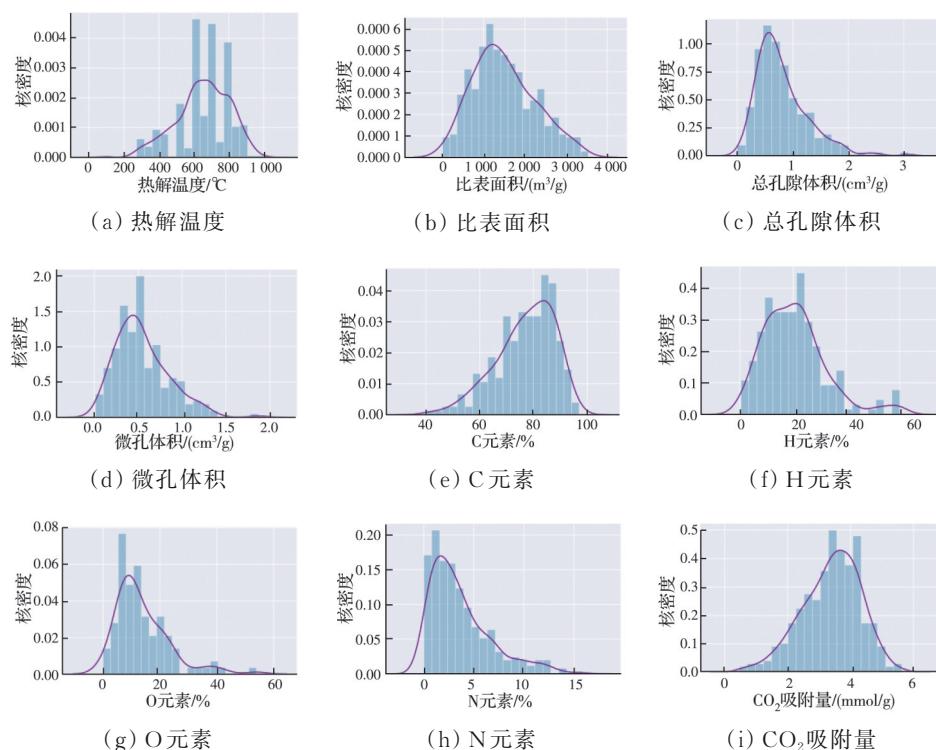


图2 变量分布直方图与核密度图

Fig. 2 Histogram of variable distribution and kernel density

1.2 算法基本原理

1.2.1 GBDT 算法

GBDT (gradient boosting decision tree) 算法使用CART回归决策树,常用于处理回归、二分类与多分类问题。GBDT算法的核心是通过每次迭代都以真实值与预测值之差作为学习目标,直至差值小于某个接近0的阈值。其主要流程为将多个弱分类器结合起来得到强分类器的结果。

1.2.2 XGB 算法

XGB(extreme gradient boosting)算法是一种基于GBDT算法的改进型,拥有更快的数据训练速度和更准确的预测精度。与传统的GDBT算法相比,XGB算法在目标函数中增加了正则化,从而控制模型的复杂度。此外,XGB算法对损失函数进行了二阶泰勒展开,使得预测结果不易过拟合,具有更高的扩展性^[19]。虽然XGB算法中树与树之间是串行关系,但同层级节点可以并行,且模型分裂出的新树可根据上次预测的残差进行拟合,自动学习缺失值的分裂方向,这使得XGB算法能够处理高维稀疏特征的表格数据。

1.2.3 LGBM 算法

LGBM(light gradient boosting machine)算法是一种高效、低内存占用、高精确度的数据科学工具,被广泛应用于数据模型的预测中。相较于XGB算法,LGBM在决策树进行特征分裂时使用梯度大、残差大的样本来生成树,与GBDT中更改样本残差有相似之处。这样使模型对某些特定训练样本有较好的划分能力,从而加大树与树之间的异质性,对于模型加权有更大提升。如图3所示,LGBM对提取特征采取并行算法,数据并行中使用分散规则将直方图合并任务分给不同机器,利用直方图作差,使计算时间大大缩短。

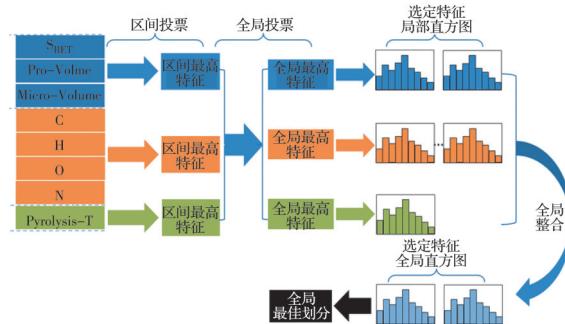


图3 LGBM算法原理示意图

Fig. 3 Schematic diagram of LGBM algorithm

1.3 模型性能评估

引入平均绝对误差(mean absolute error, MAE)、均方根误差(root mean square error, RMSE)及回归

系数R²值作为泛化性能评估,计算式为

$$\text{MAE} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |e^{(i)} - u^{(i)}| \quad (2)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (e^{(i)} - u^{(i)})^2} \quad (3)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (e^{(i)} - u^{(i)})^2}{\sum_{i=1}^m (e^{(i)} - \hat{u}^{(i)})^2} \quad (4)$$

式中: $e^{(i)}$ 为预测值; $u^{(i)}$ 为真实值; $\hat{u}^{(i)}$ 为试验平均值; m 为样本数量。

2 结果分析

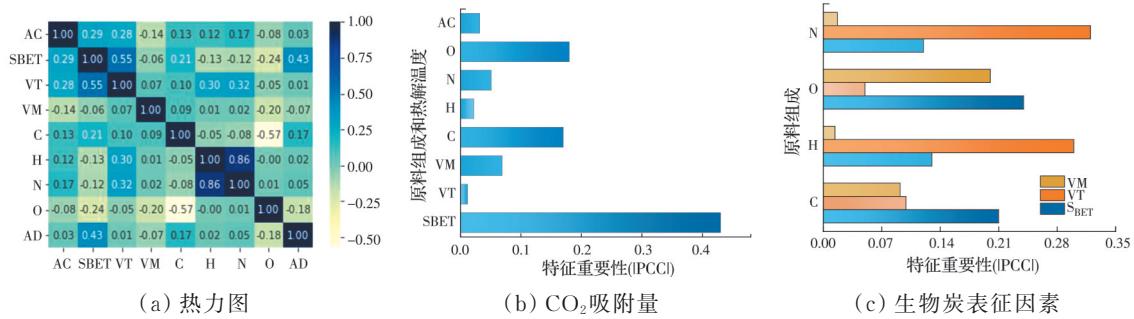
2.1 特征重要性分析

将8个输入变量(P_t 、 S_{BET} 、 V_t 、 V_m 、C、H、O、N)和输出变量CO₂吸附量(A_c)的数据集进行标准差归一化。为度量两个变量之间的相关程度,引入对原始数据要求较低的皮尔逊相关系数(Pearson's Correlation Coefficient, PCC)进行特征筛选,其计算公式为

$$\text{PCC} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (5)$$

式中: x_i 、 y_i 为数据集中的两个变量。图4(a)所示为8种变量对CO₂吸附量的PCC相关系数热力图。PCC $\in [-1, 1]$, PCC >0 或 <0 代表两变量之间呈正负相关,而PCC=0则代表两变量没有关联。PCC绝对值大小代表对输出变量的重要性、相关性大小。

此外,图4(b)、(c)进一步可视化了输入变量和输出变量之间的|PCC|值,由图可知,影响生物炭CO₂吸附量的前3个因素依次为 S_{BET} 、O含量、C含量。这可能是因为生物炭较大的比表面积提供了更多的吸附位点,并提高了颗粒表面与CO₂之间的相互作用^[20]。其次,含C、O官能团会极大影响生物炭表面酸碱度,这些官能团的引入会显著影响生物炭对CO₂的吸附过程^[21]。此外,微孔体积对生物炭吸附性能的贡献比总空隙体积更显著,这也符合微孔比中孔和大孔比表面积更大的规律,故微孔在吸附过程中同样发挥着重要作用^[22]。结合图4(a)发现, P_t 与 S_{BET} 、 V_t 有较强的相关度,可进一步分析热解温度对生物炭吸附CO₂性能的间接作用。同样,图4(c)分析了不同元素组成(C、H、O、N)对生物炭孔隙结构特征(V_m 、 V_t 、 S_{BET})的依赖性。结果发现,对 V_m 影响最大是N元素(|PCC|_N=0.2)。O、H元素

图 4 生物炭吸附 CO_2 性能特征重要性分析Fig. 4 Analysis of the importance of biochar adsorption characteristics of CO_2

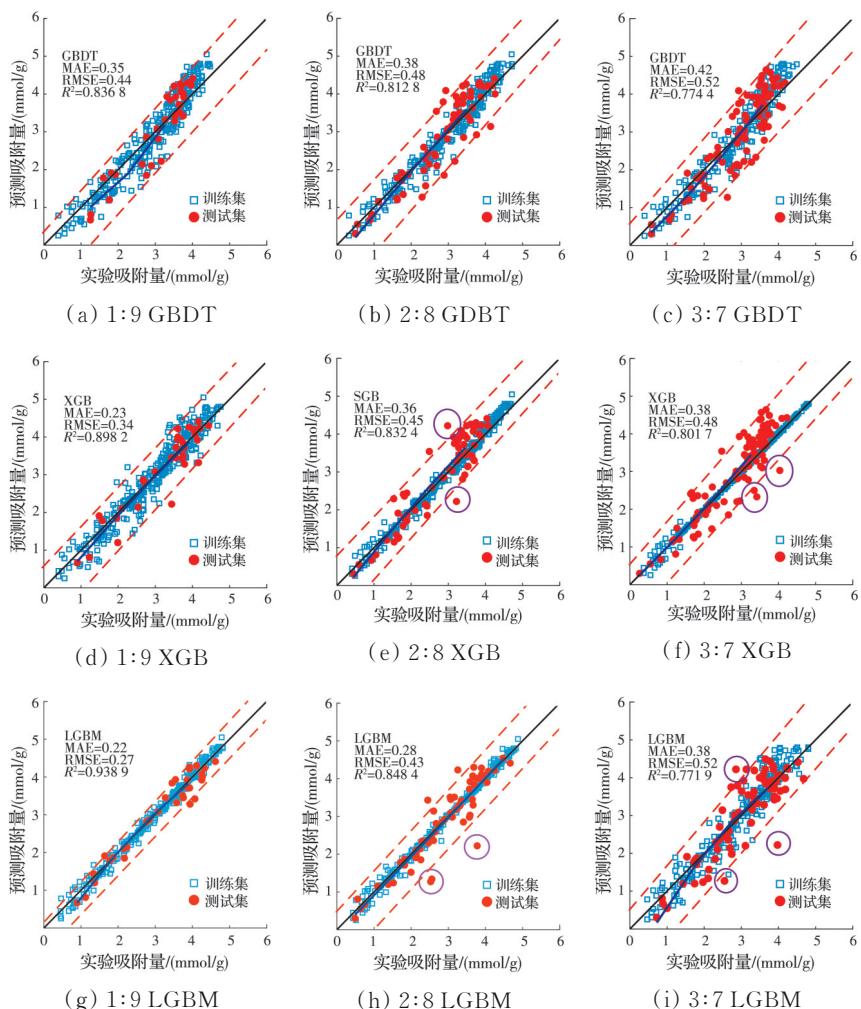
含量对 V_t 具有较高的重要性 ($|PCC| \approx 0.3$) , 而 S_{BET} 对 N、C 元素也十分敏感 ($|PCC| \approx 0.13$)。此结果进一步证实了可以采用 HNO_3 、 KOH 、 H_2O_2 等活化剂对生物炭进行改性, 从而增加生物炭比表面积、孔容量和表面官能团^[23-25]。

2.2 模型比较分析

模型的预测精度、对异常样本处理的稳定性是衡量模型优劣的关键指标。图 5 对比了 3 种算法模

型的预测结果, 图中红线区域代表 90% 置信区间, 蓝线代表训练集回归线, 偏离红线的预测点可视为波动性大的样本。

由图 5 可知, GBDT、XGB、LGBM 三种算法模型的拟合回归线几乎与直线 $y=x$ 重合, 预测结果可靠性较高。其中, LGBM 模型的预测精度最高, $R^2=0.94$ 。这是因为 LGBM 算法拥有并行计算、优化缓存、加速计算等优点, 在预测精度与计算时间方面

图 5 10%、20%、30% 测试集划分比例下 GBDT、XGB、LGBM 分别对生物炭吸附 CO_2 性能预测Fig. 5 GBDT, XGB and LGBM were respectively used to predict the CO_2 adsorption performance of biochar under the proportion of 10%, 20% and 30% test sets

更加优异^[26]。同时可以看出,GBDT模型RMSE波动最小($|\Delta\text{RMSE}|<0.04$),而XGB、LGBM模型中RMSE波动较大,且出现了红圈标注的异常样本。此外,随着测试集比例的增大,GBDT和LGBM模型的预测回归线发生了显著的变化,而XGB模型预测回归线则保持相对稳定。这可能是因为XGB算法内引入了正则项作为模型复杂的惩罚,有效限制了模型的过拟合,所以其整体稳定性不会因为测试集比例划分增大而发生变化。

2.3 部分依赖分析

部分依赖(partial dependence, PD)是将分析目标值与特征之间的交互关系进行可视化。使用PD分析了生物炭对CO₂吸附性能影响最显著的3个变量(S_{BET} 、C含量、O含量)之间的相互依赖关系。由图6(a)可知,随着比表面积 S_{BET} 的增大,生物炭对CO₂吸附性能呈先增大后平缓的趋势。当 S_{BET} 高于1300 m²/g时,进一步增大比表面积不再显著提高其吸附性能。图6(b)、(f)以等高线云图分析了生物炭 S_{BET} 与C、O含量双因素对CO₂吸附性能的依赖性。结果表明,当 S_{BET} 介于1300~1700 m²/g,生物炭对CO₂的吸附性能主要受比表面积控制,但C、O含量不能被忽略。当 S_{BET} 超过1700 m²/g时,生物炭的C、O含量对CO₂吸附性能的依赖性逐渐减弱。这可能是因为随着比表面积的增加,吸附位点对周

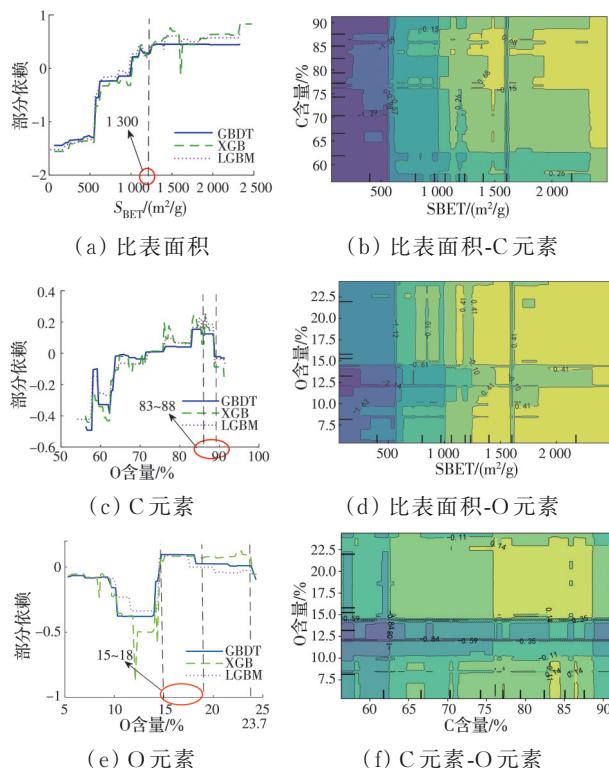


图6 CO₂吸附性能和生物炭特性的部分依赖图

Fig. 6 Partial dependence plot of CO₂ adsorption and biochar properties

围水团和CO₂的吸附形成竞争关系,抑制了CO₂的分配^[27]。受益于这一点启发,在设计生物炭吸附性能时,不应盲目追求过高的表面积。建议生物炭C含量优先选择83%~88%之间,O含量优先选择15%~18%之间。

热解温度是影响生物炭物理性质的决定性因素^[28]。图7分析了生物炭热解温度对CO₂吸附性能的部分依赖关系。可以看出:随着热解温度的上升,生物炭对CO₂的吸附性能呈先上升后下降的趋势。这是因为高温下生物炭内部的纤维素被分解,挥发性化合物蒸发,从而提高了生物炭孔隙率并增大了其比表面积^[29]。当温度继续升至700 °C时,较高的热解温度使其吸附性能提高的同时降低了产率,进而造成生物炭整体吸附性能下降^[30]。除热解温度外,生物质原材料也会影响生物炭对CO₂的吸附性能。图7中进一步分析了4种不同生物炭类型的吸附性能,发现粪便生物炭对CO₂的吸附性能远低于木质类或草本类生物炭。这可能是由于粪便生物炭具有较低的C含量,且拥有较多矿物晶体,导致热解后的孔隙结构难以形成^[31]。此外,木质类或草本类生物炭自身拥有较大的表面积和更多的活性位点,因此,对CO₂吸附性能更佳^[32]。例如,木屑生物炭在440 °C时吸附性能达到最优。

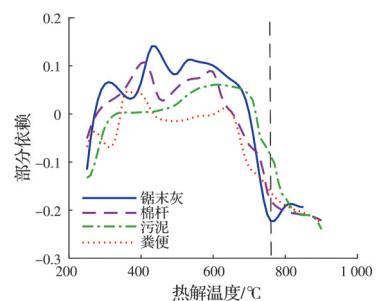


图7 生物炭的CO₂吸附能力对热解温度部分依赖图

Fig. 7 Partial dependence of CO₂ adsorption performance of biochar on pyrolysis temperature

3 讨论

使用机器学习方法建立了生物炭对CO₂吸附性能的预测模型,采用皮尔逊相关系数评估各变量的重要性,同时使用部分依赖分析3个最显著的影响因素,以增强模型的可解释性。根据特征选择,确定了8个输入变量(S_{BET} 、V_t、V_m、C含量、H含量、O含量、N含量、P_t)和一个输出变量(A_c),从而构建了CO₂吸附量数据集。使用GBDT、XGB、LGBM三种模型进行预测,并在测试集划分比例与异常样本变化方面进行了稳定性分析。3种算法模型的训练性能评估结果如表2所示。可以看出,LGBM模型

表现最佳,其次为 XGB 模型、GBDT 模型,改进的增强模型在精度上明显优于常用的决策树模型。不同算法对材料数据的预测效果存在差异。LGBM 算法适用于对精度要求高的数据集,其在预测 CO₂ 吸附性能方面精度最高。GBDT 算法对处理仪器精度不高、试验误差大的数据集更有效,特别擅长处理异常样本数据。XGB 算法对测试集划分比例影响较小,适合处理数据集出现缺失值较多、需要扩大测试集比例的情况,具有较高可靠度。

表 2 3类模型性能评估

Table 2 Three types of model performance evaluation

| 模型类型 | 缺失值 处理 | 运算 时间 | 防过 拟合 | 精度 | 异常样本 稳定性 | 测试集划 分稳定性 |
|------|-----------|----------|----------|----|-------------|--------------|
| GBDT | 无处理 | 一般 | 一般 | 一般 | 较好 | 一般 |
| XGB | 自动处理 | 一般 | 较好 | 一般 | 一般 | 较好 |
| LGBM | 自动处理 | 较快 | 较好 | 较好 | 一般 | 一般 |

对 8 个输入变量进行了皮尔逊相关系数分析,结果表明, S_{BET} 、C 含量、O 含量 3 个输入变量对生物炭吸附 CO₂ 特征重要性影响最显著,与 Zhang 等^[33]的研究结果一致。Zhang 等^[33]认为 S_{BET} 对生物炭的吸附性能贡献比 V_t 更显著,原因在于大孔隙结构更有助于气体的传播和扩散。选取对特征影响最大的 3 个输入变量进一步进行部分依赖分析,发现低温热解($<500^{\circ}\text{C}$)原材料中的挥发性气体逸散导致生物炭微孔隙得到发育,从而增强了其对 CO₂ 的吸附能力;高温热解($>700^{\circ}\text{C}$)时,生物炭孔隙结构收缩,热解温度过高使大量内部结构物质软化、融化甚至气化,导致微孔空隙大量消失,使吸附性能显著降低^[34-35]。

该模型不仅考虑了生物炭本身化学组成成分、热解条件,还考虑了生物炭物理性质特征,从而提高了预测结果的泛化精度。所使用的数据集是在 100 kPa 与 25 °C 外界条件下测得的,但在不同的气压和温度条件下,CO₂ 吸附性能可能会有不同的表现。因此,外部因素对生物炭吸附 CO₂ 性能的影响仍需要进一步探讨。部分依赖分析只考虑了 8 种输入变量之间的关系,并未考虑 KOH 或 K₂CO₃ 在不同温度下活化的生物炭对 CO₂ 吸附性能的影响。此外,未来的研究将进一步通过试验来验证所建立模型的可靠性,为今后建立生物炭智慧碳库提供更好的数据和借鉴。

4 结论

采用 GBDT、XGB、LGBM 三种机器学习模型对生物炭吸附 CO₂ 的性能进行了预测,将 3 种模型的精度与稳定性进行了对比与分析,以确定不同表

征下生物炭对 CO₂ 的吸附能力,得出以下结论:

1) 影响生物炭 CO₂ 吸附量的前 3 个因素依次为比表面积 S_{BET} 、C 含量、O 含量,选择比表面积较大或 C、O 含量丰富的生物炭更有利与碳封存和捕捉。

2) 不同算法对材料数据不同性能的预测效果存在差异。LGBM 算法适用于对精度要求高的数据集;GBDT 算法适用于处理异常样本和试验误差大的数据集;而 XGB 算法对测试集划分比例和缺失值的处理更具有可靠性。

3) 预测部分依赖图结果表明,生物炭表面积 S_{BET} 超过 1 300 m²/g 时,CO₂ 吸附性能不再明显增强。当 1 000 m²/g $< S_{BET} < 1 700 \text{ m}^2/\text{g}$ 时,需考虑生物炭本身碳、氧含量对吸附性能的影响,超过 1 700 m²/g 时,生物炭吸附 CO₂ 性能由表面积决定。在热解温度为 300~700 °C 时,生物炭进行 CO₂ 吸附效果最好,其中木屑生物炭在 440 °C 热解温度时达到最佳吸附效果。

参考文献

- [1] DISSANAYAKE P D, CHOI S W, IGALAVITHANA A D, et al. Sustainable gasification biochar as a high efficiency adsorbent for CO₂ capture: A facile method to designer biochar fabrication [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 124: 109785.
- [2] 张宇航, 李伟, 马春慧, 等. 多孔炭材料吸附 CO₂ 研究进展[J]. 林产化学与工业, 2021, 41(1): 107-122.
ZHANG Y H, LI W, MA C H, et al. Progress of research on CO₂ adsorption by porous carbon materials [J]. Chemistry and Industry of Forest Products, 2021, 41(1): 107-122. (in Chinese)
- [3] ZHANG X, ZHANG S H, YANG H P, et al. Nitrogen enriched biochar modified by high temperature CO₂-ammonia treatment: Characterization and adsorption of CO₂ [J]. Chemical Engineering Journal, 2014, 257: 20-27.
- [4] 董华松, 黄文辉. CO₂ 捕捉与地质封存及泄漏监测技术现状与进展 [J]. 资源与产业, 2010, 12(2): 123-128.
DONG H S, HUANG W H. Research of CO₂ capture, geological storage and leakage technologies [J]. Resources & Industries, 2010, 12(2): 123-128. (in Chinese)
- [5] 崔鸿勋. 碱金属盐修饰中高温 CO₂ 固体吸附材料的构效关系和吸附机理研究 [D]. 上海: 华东理工大学, 2021.
CUI H J. Structure-performance relationship and sorption mechanisms of alkali metal salt-promoted solid sorbents for intermediate-and high-temperature CO₂ capture [D]. Shanghai: East China University of Science and Technology, 2021. (in Chinese)
- [6] 张琳, 刘洪波, 张红波. 双电层电容器用多孔炭材料的

- 研究与开发 [J]. 炭素, 2003(4): 3-9.
- ZHANG L, LIU H B, ZHANG H B. Research and development of porous carbon materials for electric double-layer capacitor [J]. Carbon, 2003(4): 3-9. (in Chinese)
- [7] SEOW Y X, TAN Y H, MUBARAK N M, et al. A review on biochar production from different biomass wastes by recent carbonization technologies and its sustainable applications [J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2022, 10(1): 107017.
- [8] YUE L M, XIA Q Z, WANG L W, et al. CO₂ adsorption at nitrogen-doped carbons prepared by K₂CO₃ activation of urea-modified coconut shell [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2018, 511: 259-267.
- [9] WANG R T, WANG P Y, YAN X B, et al. Promising porous carbon derived from celtuce leaves with outstanding supercapacitance and CO₂ capture performance [J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2012, 4(11): 5800-5806.
- [10] CAO L Y, ZHANG X Y, XU Y, et al. Straw and wood based biochar for CO₂ capture: Adsorption performance and governing mechanisms [J]. Separation and Purification Technology, 2022, 287: 120592.
- [11] TIWARI D, BHUNIA H, BAJPAI P K. Urea-formaldehyde derived porous carbons for adsorption of CO₂ [J]. RSC Advances, 2016, 6(113): 111842-111855.
- [12] YANG J E, YUE L M, HU X, et al. Efficient CO₂ capture by porous carbons derived from coconut shell [J]. Energy & Fuels, 2017, 31(4): 4287-4293.
- [13] YANG X P, YUAN C, HE S R, et al. Machine learning prediction of specific capacitance in biomass derived carbon materials: Effects of activation and biochar characteristics [J]. Fuel, 2023, 331: 125718.
- [14] ZHU X Z, TSANG D C W, WANG L, et al. Machine learning exploration of the critical factors for CO₂ adsorption capacity on porous carbon materials at different pressures [J]. Journal of Cleaner Production, 2020, 273: 122915.
- [15] ABDI J, HADAVIMOGHADDAM F, HADIPOOR M, et al. Modeling of CO₂ adsorption capacity by porous metal organic frameworks using advanced decision tree-based models [J]. Scientific Reports, 2021, 11: 24468.
- [16] HALALSHEH N, ALSHBOUL O, SHEHADEH A, et al. Breakthrough curves prediction of selenite adsorption on chemically modified zeolite using boosted decision tree algorithms for water treatment applications [J]. Water, 2022, 14(16): 2519.
- [17] YUAN X Z, SUVARNA M, LOW S, et al. Applied machine learning for prediction of CO₂ adsorption on biomass waste-derived porous carbons [J]. Environmental Science & Technology, 2021, 55(17): 11925-11936.
- [18] LI Y Z, GUPTA R, YOU S M. Machine learning assisted prediction of biochar yield and composition via pyrolysis of biomass [J]. Bioresource Technology, 2022, 359: 127511.
- [19] 熊余婷. 基于XGB_BN模型的福州市水质评价研究 [D]. 福州: 福建师范大学, 2021.
- XIONG Y T. Study on water quality evaluation of Fuzhou city based on XGB_BN model [D]. Fuzhou: Fujian Normal University, 2021. (in Chinese)
- [20] ZHAO H, LIU X, CAO Z, et al. Adsorption behavior and mechanism of chloramphenicols, sulfonamides, and non-antibiotic pharmaceuticals on multi-walled carbon nanotubes [J]. Journal of Hazardous Materials, 2016, 310: 235-245.
- [21] ZHANG Y, WANG S Z, FENG D D, et al. Functional biochar synergistic solid/liquid-phase CO₂ capture: A review [J]. Energy & Fuels, 2022, 36(6): 2945-2970.
- [22] ZHANG S J, SHAO T, KOSE H S, et al. Adsorption of aromatic compounds by carbonaceous adsorbents: A comparative study on granular activated carbon, activated carbon fiber, and carbon nanotubes [J]. Environmental Science & Technology, 2010, 44(16): 6377-6383.
- [23] JIAO S, CHENG L, LI P, et al. Study on fatigue crack monitoring of metallic aircraft structure based on attached eddy current sensor [M]//Structural Health Monitoring and Integrity Management. CRC Press, 2015: 239-245.
- [24] JIN H M, CAPAREDA S, CHANG Z Z, et al. Biochar pyrolytically produced from municipal solid wastes for aqueous As(V) removal: Adsorption property and its improvement with KOH activation [J]. Bioresource Technology, 2014, 169: 622-629.
- [25] ZUO X J, LIU Z G, CHEN M D. Effect of H₂O₂ concentrations on copper removal using the modified hydro-thermal biochar [J]. Bioresource Technology, 2016, 207: 262-267.
- [26] CHEN H Y, LI X Y, FENG Z B, et al. Shield attitude prediction based on Bayesian-LGBM machine learning [J]. Information Sciences, 2023, 632: 105-129.
- [27] ZHU X Z, HE M J, SUN Y Q, et al. Insights into the adsorption of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) on biochar and activated carbon with the aid of machine learning [J]. Journal of Hazardous Materials, 2022, 423: 127060.
- [28] WOOLF D, AMONETTE J E, STREET-PERROTT F A, et al. Sustainable biochar to mitigate global climate change [J]. Nature Communications, 2010, 1: 56.
- [29] GRAY M, JOHNSON M G, DRAGILA M I, et al. Water uptake in biochars: The roles of porosity and hydrophobicity [J]. Biomass and Bioenergy, 2014, 61: 196-205.

- [30] KUA H W, PEDAPATI C, LEE R V, et al. Effect of indoor contamination on carbon dioxide adsorption of wood-based biochar: Lessons for direct air capture[J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 210: 860-871.
- [31] ZHAO L, CAO X D, MAŠEK O, et al. Heterogeneity of biochar properties as a function of feedstock sources and production temperatures [J]. Journal of Hazardous Materials, 2013, 256/257: 1-9.
- [32] WANG S S, GAO B, ZIMMERMAN A R, et al. Physicochemical and sorptive properties of biochars derived from woody and herbaceous biomass [J]. Chemosphere, 2015, 134: 257-262.
- [33] ZHANG K, ZHONG S F, ZHANG H C. Predicting aqueous adsorption of organic compounds onto biochars, carbon nanotubes, granular activated carbons, and resins with machine learning [J]. Environmental Science & Technology, 2020, 54(11): 7008-7018.
- [34] GUO J, CHONG LUA A. Characterization of chars pyrolyzed from oil palm stones for the preparation of activated carbons [J]. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 1998, 46(2): 113-125.
- [35] FU P, YI W M, BAI X Y, et al. Effect of temperature on gas composition and char structural features of pyrolyzed agricultural residues [J]. Bioresource Technology, 2011, 102(17): 8211-8219.

(编辑 胡玲)