

基于偏最小二乘回归模型探究生物质理化性质对生物炭孔结构形成的影响

刘 静,张永奎,王雅博*

(四川大学化学工程学院,四川 成都 610065)

摘要:为揭示生物质理化性质对生物炭孔结构形成的影响规律,利用偏最小二乘回归模型系统分析生物质组成特征与生物炭孔结构参数之间的关系。纤维素含量较高且灰分较低的生物质有利于形成高比表面积、以微孔为主的孔结构;富含碱金属和碱土金属元素的生物质可促进孔隙扩展并增加介孔比例,但过高的无机矿物含量不利于孔结构稳定;木质素和碳含量较高的生物质易形成致密碳骨架,对孔径扩展具有抑制作用。研究结果为生物炭原料筛选及孔结构定向调控提供了参考。

关键词:生物质;生物炭;偏最小二乘回归;多变量分析

中图分类号:TQ127.1;X705

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2026)S2-0232-07

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.S2.038

Investigating the influence of biomass physicochemical properties on biochar pore structure formation based on partial least squares regression

LIU Jing, ZHANG Yong-kui, WANG Ya-bo*

(School of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

Abstract:To elucidate the influence of biomass physicochemical properties on the formation of biochar pore structures, the relationships between biomass composition characteristics and biochar pore structure parameters were systematically analyzed through the partial least squares regression model. The results indicate that biomass with higher cellulose content and lower ash content is more favorable for the formation of biochars with high specific surface area and predominantly microporous structures. Biomass rich in alkali and alkaline earth metal elements promotes pore development and increases the proportion of mesopores; however, excessive inorganic mineral content is detrimental to pore structure stability. In contrast, biomass with higher lignin and carbon contents tends to form dense carbon frameworks, thereby inhibiting pore enlargement. These findings provide a useful reference for biomass feedstock selection and the directional regulation of biochar pore structures.

Key words: biomass; biochar; partial least squares regression; multivariate analysis

生物炭在吸附分离、能源转化及环境修复等领域具有重要应用前景,其孔结构特征在很大程度上决定了材料的性能^[1-3]。已有研究表明,热解温度、活化剂类型及用量等工艺条件对生物炭孔结构具有显著影响^[4-7]。然而,在相同制备条件下,不同生物质原料制备的生物炭仍表现出明显差异,表明原料自身理化性质是影响成孔行为的重要内在因素^[8-10]。生物质的三素(纤维素、半纤维素、木质素)组成、元素组成及灰分和矿物元素含量会影响其热解行为、碳骨架演化及活化反应过程,从而调控生物炭孔结构形成^[11-13]。现有研究多聚焦于单一生物质体系或单一理化参数,未能充分反映多种高度相关理化性质对孔结构形成的综合作用,制约了生物炭工程制备过程中原料选择与孔结构调控的定

量化和可预测性。因此,有必要从多变量整体视角系统分析生物质理化性质与生物炭孔结构之间的关系^[14]。偏最小二乘回归方法(partial least squares regression, PLSR)可在变量共线性条件下有效识别主控因素^[15]。基于此,本研究在同一热解条件下制备多种生物炭,结合孔结构表征与多变量统计分析,定量揭示不同理化性质对孔结构形成的影响规律。

1 实验材料和方法

1.1 材料与试剂

柠檬酸钾,上海麦克林生化科技有限公司;稻壳、水稻秸秆、玉米芯、玉米秸秆、木粉、松木、青竹、黄竹、小麦秸秆、麦麸、花生壳、花生秸秆、核桃壳、酒糟等生物质,苏锐农产品深加工公司。

收稿日期:2026-03-05;修回日期:2026-06-17

基金项目:国家自然科学基金(22178227)

作者简介:刘静(2001-),女,硕士生,研究方向为生物炭材料制备及应用,971047791@qq.com;王雅博(1985-),男,博士,副教授,研究方向为生物质转化、微生物矿化和环境催化,通讯联系人,ybwang@scu.edu.cn。

1.2 实验方法

1.2.1 生物炭的制备

将预干燥生物质粉碎并过 35 目筛后,与柠檬酸钾按 1:2 质量比充分混合,置于刚玉坩埚中,在 Ar 气氛(100 mL/min)下以 10℃/min 升温至 900℃并保温 2 h。冷却后用去离子水洗涤至近中性,60℃干燥 12 h,所得样品记为 BC-*x*,其中 *x* 表示生物质种类。

1.2.2 生物质原料理化性质和生物炭孔结构的表征

采用化学分析法测定纤维素、半纤维素和木质素含量;利用元素分析仪测定 C、H、N 元素含量;灰分含量采用标准灼烧法测定;利用 X 射线荧光光谱分析灰分中 K、Ca、Si 等主要矿物元素的含量。

采用 N₂ 吸附-脱附技术表征生物炭的孔结构。比表面积通过 BET 模型计算;微孔体积(*V*_{micro})和介孔体积(*V*_{meso})由 DFT 方法获得;总孔体积(*V*_{total})依据高相对压力区间的吸附量估算;大孔体积(*V*_{macro})通过差值法计算;平均孔径(*D*_{ave})采用 BJH 模型基于脱附曲线得到。

1.2.3 偏最小二乘回归模型的构建与数据处理

PLSR 方法能够在自变量高度相关且样本数量有限的情况下构建稳定模型,适用于复杂原料体系下孔结构性能的预测分析。模型中,以生物质理化性质参数作为自变量矩阵 *X*,包括三素含量、元素组成、灰分及主要矿物元素含量;以生物炭孔结构参数作为因变量矩阵 *Y*,包括比表面积及各级孔体积和平均孔径。所有变量在建模前均进行中心化和标准化处理,以消除量纲差异。潜变量数量通过交叉验证确定,以兼顾模型解释能力和预测精度。

模型的拟合优度采用决定系数 *R*² 表征,相关公式如式(1)所示^[14]。其中,*y_i*为第 *i* 个样本的实验观测值;*ŷ_i*为 PLSR 模型预测值;*ȳ_i*为观测值的平均值;*n*为样本数量。*R*²用于衡量模型对响应变量方

差的解释能力,其值越接近 1,说明模型拟合效果越好。模型预测能力通过交叉验证计算的 *Q*² 指标进行评估,相关公式如式(2)所示^[14]。其中,*ŷ_{i, cv}*表示通过交叉验证获得的第 *i* 个样本的预测值。考虑到本研究主要关注生物质理化性质对孔结构参数的相对贡献及其统计关联特征,*Q*²结果仅用于模型稳定性参考,而不作为模型优选或预测性能评价的唯一依据。

$$R^2 = 1 - [\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2] / [\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2] \quad (1)$$

$$Q^2 = 1 - [\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_{i, cv})^2] / [\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2] \quad (2)$$

此外,模型的预测误差通过均方根误差(*RMSE*)进行量化,其计算公式如式(3)所示^[14]。

$$RMSE = \sqrt{(1/n) \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

为进一步分析各生物质理化性质参数在模型中的相对重要性,引入变量重要性投影值(Variable Importance in Projection, *VIP*)及回归系数对模型结果进行解释。通常认为 *VIP* 值大于 1 的变量在模型中具有显著贡献,可被视为影响生物炭孔结构形成的关键因子^[16]。结合回归系数的正负性与大小,对不同理化性质参数对孔结构演化的促进或抑制作用进行定量分析^[17]。

所有数据处理与模型计算均在 Python 软件环境中完成。

2 结果与讨论

2.1 典型生物质的理化性质

表 1 汇总了本研究选取的 15 种典型生物质的三素组成、灰分含量、元素组成及主要无机矿物元素分布情况。不同生物质在有机组分构成和无机矿物含量方面差异显著,这种理化性质的多样性为后续基于 PLSR 模型定量解析生物质理化性质对生物炭孔结构形成的影响提供了多样化的数据基础。

表 1 生物质样品的理化性质

样品	木质素/%	纤维素/%	半纤维素/%	灰分/%	C/%	H/%	N/%	K/%	Ca/%	Si/%
稻壳	37.30	17.90	36.10	15.28	38.59	4.50	0.31	0.71	0.14	6.33
水稻秸秆	37.30	17.10	33.10	17.57	37.19	4.34	0.51	1.55	0.38	6.31
玉米芯	21.90	29.30	33.30	15.31	43.45	5.16	0.45	7.39	0.38	1.40
玉米秸秆	35.10	16.70	30.40	2.40	38.53	4.46	0.55	0.27	0.06	0.77
木粉	25.40	14.80	31.30	16.91	42.81	4.83	0.36	0.22	6.68	1.00
松木	28.40	15.00	37.50	1.89	42.80	5.22	3.13	0.19	0.47	0.21
青竹	28.50	19.70	37.20	1.62	44.98	5.20	0.21	0.62	0.10	0.06
黄竹	30.00	17.50	35.30	15.47	38.25	4.48	0.38	0.92	0.15	6.24
小麦秸秆	34.10	18.20	32.80	17.97	38.18	4.46	0.54	1.55	0.36	5.58

续表

样品	木质素/%	纤维素/%	半纤维素/%	灰分/%	C/%	H/%	N/%	K/%	Ca/%	Si/%
麦麸	10.20	20.90	34.80	5.00	41.26	5.84	2.52	2.03	0.32	0.03
核桃壳	36.10	25.80	24.70	0.59	46.69	6.20	0.00	0.17	0.00	0.01
花生壳	38.00	34.10	17.90	16.70	37.59	5.62	0.24	0.86	0.16	6.86
花生秸秆	29.20	18.10	9.80	22.81	37.42	5.80	1.18	4.19	3.66	3.33
桦木	28.10	34.60	24.50	0.94	45.05	6.42	0.00	0.09	0.41	0.01
酒糟	22.90	31.40	8.50	7.19	45.71	7.09	3.58	2.85	1.01	0.94

农业废弃物类生物质(如稻壳、水稻秸秆、小麦秸秆和玉米秸秆)整体具有较高的木质素和半纤维素含量,而纤维素含量相对较低,其中稻壳和水稻秸秆的木质素含量均达到 37.30%,表明其芳香结构比例较高。木质类生物质(如桦木和核桃壳)纤维素含量较高,灰分含量较低,体现出较为稳定且纯净的有机碳骨架特征。部分生物质(如花生壳和核桃壳)同时具有较高的木质素和纤维素含量,预示其在热解过程中可能形成较为致密的碳骨架结构^[18]。

不同生物质的灰分含量差异显著,木质类生物质(如桦木、松木和青竹粉)的灰分含量普遍低于 2%,而农业秸秆及加工副产物(如稻壳、小麦秸秆、黄竹粉和花生壳)灰分含量相对较高。较高的灰分含量表明生物质中无机矿物组分丰富,其在热解和活化过程中可能通过催化气化或孔道阻塞等方式对生物炭孔结构的形成产生重要影响^[19]。

生物质原料的碳含量分布在 37.19%~46.69% 之间,其中核桃壳、桦木和酒糟的碳含量相对较高,表明其具有较好的碳化潜力。氢含量变化范围为 4.34%~7.09%,酒糟样品的氢含量较高,反映其有机组分中脂肪族或蛋白质结构比例较大。部分生物质(如松木、麦麸和酒糟)表现出相对较高的氮含量,说明其在碳化后可能形成含氮官能团,为后续功能应用提供潜在活性位点^[20]。

玉米芯和花生秸秆中 K 含量较高,而稻壳、水稻秸秆、小麦秸秆及花生壳中 Si 含量明显偏高,这是典型草本生物质的特征。已有研究表明,K、Ca 等碱金属和碱土金属元素在热解与活化过程中可促进气化反应,有利于孔结构生成^[21];而较高的 Si 含量则可能通过形成致密硅酸盐结构,对孔隙发育产生抑制作用^[22]。

2.2 生物炭的孔结构特征

表 2 汇总了本研究制备的 15 种典型生物炭的比表面积(S_{BET})、微孔体积(V_{micro})、介孔体积(V_{meso})、大孔体积(V_{macro})及平均孔径(D_{ave})等孔结

构参数。不同生物质原料制备的生物炭在孔结构特征上存在显著差异,反映出原料理化性质对生物炭成孔行为具有重要调控作用。

表 2 生物炭样品的孔结构特征

样品	$S_{\text{BET}}/$ ($\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$)	$V_{\text{micro}}/$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)	$V_{\text{meso}}/$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)	$V_{\text{macro}}/$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)	$D_{\text{ave}}/$ nm
BC-稻壳	1971.59	0.590	0.207	0.265	3.32
BC-水稻秸秆	1861.40	0.561	0.162	0.272	3.51
BC-玉米芯	1513.54	0.434	0.207	0.224	3.34
BC-玉米秸秆	1206.03	0.376	0.131	0.194	5.21
BC-木粉	1229.18	0.379	0.114	0.141	3.29
BC-松木	1127.52	0.353	0.082	0.121	3.29
BC-青竹粉	712.87	0.216	0.079	0.105	3.62
BC-黄竹粉	1870.28	0.594	0.103	0.238	3.73
BC-小麦秸秆	1313.57	0.410	0.105	0.141	3.23
BC-麦麸	1837.27	0.571	0.117	0.247	3.41
BC-核桃壳	1102.31	0.347	0.073	0.101	3.55
BC-花生壳	1808.14	0.566	0.130	0.180	4.50
BC-花生秸秆	1025.57	0.270	0.286	0.114	3.93
BC-桦木	1460.89	0.444	0.137	0.136	3.10
BC-酒糟	2027.36	0.675	0.264	0.257	2.99

BC-酒糟的 S_{BET} 最高,其次为稻壳、黄竹粉和麦麸生物炭;而青竹、核桃壳和花生秸秆生物炭的 S_{BET} 相对较低。 V_{micro} 的变化趋势与 S_{BET} 基本一致,BC-酒糟/稻壳/黄竹的 V_{micro} 较大,占总孔体积的主要部分,说明其孔结构以微孔为主;青竹粉和花生秸秆生物炭的 V_{micro} 较低,其孔结构中中介孔和大孔占比相对较高。BC-花生秸秆的 V_{meso} 最高,显示出以介孔为主导的孔结构特征;而 BC-稻壳/水稻秸秆/玉米芯等样品的 V_{meso} 相对较小,孔结构仍以微孔为主。 V_{macro} 在不同生物炭样品之间的变化幅度相对较小,多数样品分布在 0.10~0.27 cm^3/g 范围内,其中,BC-酒糟/花生秸秆的大孔体积相对较高。 D_{ave} 分析结果显示,生物炭样品的孔径集中在 3.0~3.7 nm 区间,呈现典型的微孔-介孔复合结构特征。

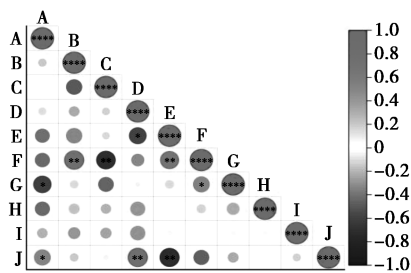
上述结果表明,生物质前驱体的有机骨架组成

及灰分含量对 S_{BET} 具有显著影响,高纤维素含量和适中的木质素比例有利于微孔结构的充分发育,而灰分含量过高或过低均可能抑制孔隙形成^[23]。不同生物质成分及矿物元素类型对介孔生成具有差异化影响,碱金属和碱土金属元素可能通过催化气化过程促进介孔形成,而高灰分或高硅含量则可能限制微孔的进一步发育^[24]。

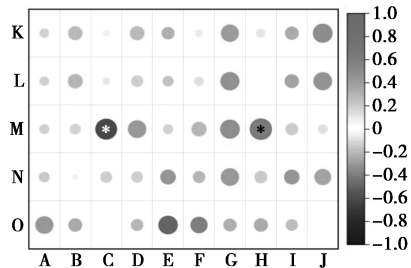
2.3 PLSR 模型的拟合结果与可靠性分析

2.3.1 变量相关性特征与 PLSR 方法适用性分析

为揭示生物质理化性质参数与生物炭孔结构指标之间的相关性特征,对自变量(A~J)与因变量(K~O)进行了相关性分析,其中,A~J 分别代表木质素、纤维素、半纤维素、灰分、C、H、N、K、Ca、Si 含量,K~O 分别代表 S_{BET} 、 V_{micro} 、 V_{meso} 、 V_{macro} 及 D_{ave} 。从自变量之间的相关性矩阵[图 1(a)]可知,生物质理化性质参数之间普遍存在显著相关关系。这表明生物质理化性质参数并非相互独立,而是受到生物质来源和组成特征的共同制约,具有典型的多重共线性特征^[9]。进一步分析自变量与因变量之间的相关性[图 1(b)]可以发现,不同理化性质参数对生物炭孔结构指标的相关程度和作用方向存在明显差异。例如,有机骨架相关参数(如 A~C)与 S_{BET} 和 V_{micro} 呈现正相关,而部分矿物元素参数则与 V_{meso} 或 D_{ave} 表现出不同程度的相关性。同时,同一理化性质对不同孔结构指标的相关性并不一致,表明生物炭孔结构的形成受到多种理化因素的协同影响。



(a) 生物质理化性质之间的相关性矩阵热图



(b) 生物质理化性质与生物炭孔结构参数之间的相关性矩阵热图

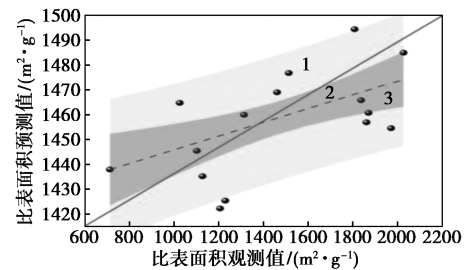
图 1 相关性矩阵热图

因此,本研究体系同时具有自变量高度相关和

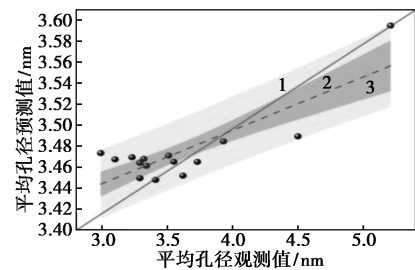
多因变量响应差异显著的特征,采用传统单变量分析或多元线性回归方法难以准确分离各理化性质参数对孔结构形成的独立贡献,引入 PLSR 模型对该多变量体系进行分析具有合理性和必要性^[25]。

2.3.2 PLSR 模型的拟合与预测性能

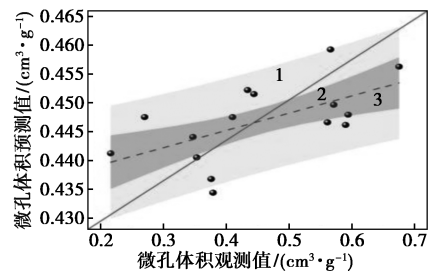
如图 2 所示,5 个目标变量的预测值均随观测值增加而呈现明显的正相关,数据点主要分布于 1:1 参考线附近,表明所构建的 PLSR 模型能够合理反映生物质理化性质与生物炭孔结构参数之间的内在联系,具有良好的整体拟合性能。拟合优度结果(表 3)表明,模型对 D_{ave} 和 V_{meso} 的解释能力相对较强,其 R^2 分别为 0.653 和 0.719,说明生物质理化特征能够较好地解释孔径尺度及介孔结构的变化规律。这一结果与图中较为集中的预测-观测分布相一致,表明 D_{ave} 和 V_{meso} 主要受生物质整体结构特征和活化行为的协同调控。相比之下, S_{BET} 、 V_{micro} 和 V_{macro} 的 R^2 相对较小,但仍表现出明确的线性趋势,说明模型能够捕捉其总体变化方向。其拟合程度相对较低,可能与微孔和大孔形成过程受多因素耦合作用、局部结构差异以及非线性演化机制影响较大有关^[26]。



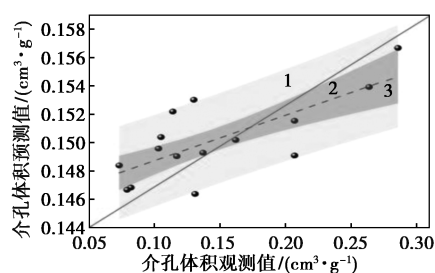
(a) 比表面积



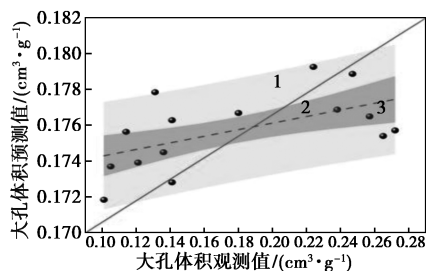
(b) 平均孔径



(c) 微孔体积



(d) 介孔体积



(e) 大孔体积

1—85%预测区;2—85%置信区;3—线性拟合

图 2 模型预测值与实验观测值对比

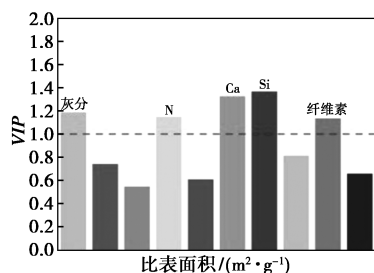
表 3 模型的拟合优度 R^2 和均方根误差 $RMSE$

目标变量	R^2	$RMSE$
S_{BET}	0.537	266.658
D_{ave}	0.653	0.329
V_{micro}	0.542	0.588
V_{meso}	0.719	0.034
V_{macro}	0.480	0.044

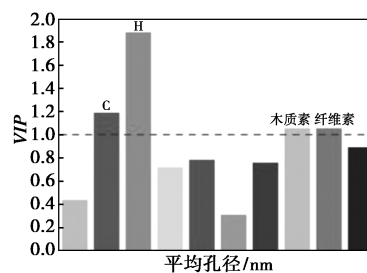
$RMSE$ 结果进一步反映了不同孔结构参数的预测误差水平。 S_{BET} 的 $RMSE$ 较大,主要源于其数值跨度较宽、样本间差异显著;而 D_{ave} 及各级孔体积分数的 $RMSE$ 均处于较低水平,表明在各自数值范围内模型预测偏差相对有限。这与预测值在置信区间内的分布特征相一致,进一步验证了模型拟合结果的合理性。

2.3.3 影响生物炭孔结构形成的主要生物质理化性质

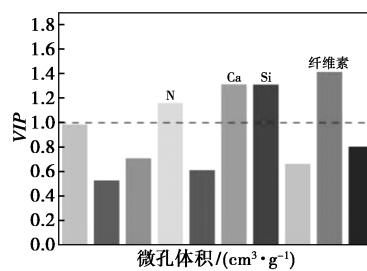
通过比较不同孔结构参数对应的 VIP 排序(图 3)及回归系数的符号与显著性特征(图 4),可以从统



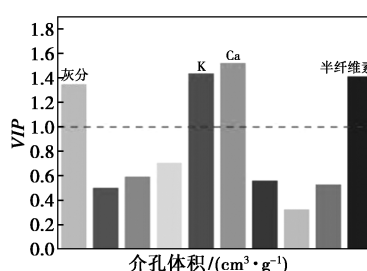
(a) 比表面积



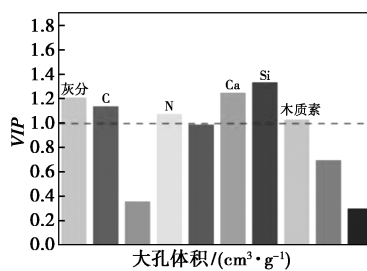
(b) 平均孔径



(c) 微孔体积



(d) 介孔体积



(e) 大孔体积

图 3 变量重要性投影(VIP)分析

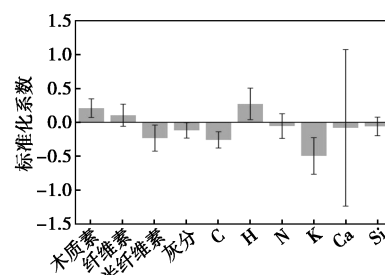


图 4 生物质理化性质对生物炭孔结构参数的标准化回归系数

计关联层面反映生物质有机骨架组成、元素特征及无机矿物组分在孔结构演化过程中的差异化影

响趋势。

S_{BET} 的 VIP 分析结果如图 3(a) 所示,灰分、Ca、Si、N 及纤维素在 S_{BET} 模型中均表现出较高的重要性 ($VIP > 1$)。进一步结合标准化回归系数(图 4)及其置信区间可以看出,在本研究所建立的模型及实验条件范围内,灰分的回归系数为负且未跨越零点,表明其与 S_{BET} 之间存在显著的负相关关系。相比之下,Ca、Si、N 及纤维素虽具有较高的 VIP 值,但其回归系数置信区间均跨越零点,说明其对 S_{BET} 的直接影响不具备统计显著性,相关作用可能更多体现为间接调控或与其他变量的协同效应。

D_{ave} 的 VIP 分析结果[图 3(b)]显示,H、C 及木质素含量具有较高的重要性,表明元素组成及碳骨架结构特征与孔径尺度演化密切相关。回归系数分析(图 4)进一步表明,H 对 D_{ave} 具有显著的正向相关关系,而 C 的回归系数为负且未跨越零点,说明较高的碳含量与孔径进一步放大呈显著负相关趋势。通常认为,较高的 H 含量对应较低的芳香化程度,在热解及活化过程中更易发生结构重排与孔隙扩展,从而可能促进孔径增大^[27]。相对而言,纤维素虽在 VIP 排名中占有一定位置,但其回归系数不具统计显著性,表明其对孔径演化的影响更多体现为与其他组分的协同调控。

在 V_{micro} 的 PLSR 模型中[图 3(c)],Ca、Si、N 及纤维素均表现出较高的 VIP 值,说明上述因素在模型预测中具有一定贡献。然而,标准化回归系数结果显示(图 4),这些变量的置信区间大多跨越零点,表明其对 V_{micro} 的直接影响在统计意义上并不显著。因此, V_{micro} 并非由单一理化性质主导,而是碳骨架生成行为与无机矿物参与过程协同作用的结果,体现出明显的多因素耦合特征。

V_{meso} 的 VIP 分析结果如图 3(d) 所示,灰分、K、Ca 及半纤维素在模型中具有较高的重要性。其中,K 的标准化回归系数为负且未跨越零点,表明其对 V_{meso} 具有显著负相关关系。这可能与 K 在活化过程中引发的过度催化气化行为有关^[28],过强的反应强度易导致孔壁烧蚀或孔隙合并,从而不利于稳定介孔结构的形成。相比之下,Ca 的回归系数置信区间跨越零点,说明其对 V_{meso} 的影响不具显著性。半纤维素的回归系数为负且显著,表明其快速热解特性可能不利于介孔结构的持续发育与稳定保留。

对于 V_{macro} [图 3(e)],灰分、C 及木质素表现出较高的 VIP 值,说明大孔结构的形成受多种因素协同影响。回归系数分析表明(图 4),灰分和 C 对

V_{macro} 具有显著作用,而 Ca、Si 及 N 的回归系数置信区间较大且跨越零点,表明其影响不稳定或缺乏统计显著性。木质素虽表现为正向贡献,但其作用幅度相对有限,说明大孔结构的形成不仅与无机矿物诱导的孔隙扩展有关,还与生物质原始组织结构的继承及碳骨架稳定性密切相关。

综上所述,PLSR 模型从统计层面反映了生物质理化性质对各级孔结构参数的贡献差异,表明生物炭孔结构的形成过程具有明显的多变量耦合特征。

2.3.4 生物炭孔结构形成的协同作用机制探讨

PLSR 模型结果表明,生物炭孔结构的形成是碳骨架生成特征与无机矿物组分共同作用的结果,其调控过程呈现出明显的多尺度、多路径和非线性特征。不同理化性质变量在模型中的作用既相互关联又相互制约,单一因素难以独立决定孔结构参数的演化方向。

碳骨架相关组分主要通过影响热解过程中碳结构的芳香化程度、稳定性及重排方式,对孔结构的基础形态与尺度分布产生决定性影响^[29]。其中,氢含量的提高有利于碳骨架的柔性重构和孔径扩展,而碳含量的增加则倾向于增强骨架致密性,对孔隙扩展形成一定约束。这种相互作用决定了不同孔尺度之间的转化潜力,构成孔结构演化的内在驱动力。

无机矿物组分在孔结构形成过程中则表现出显著的协同与制衡效应。灰分含量整体水平对孔隙发育具有重要调节作用,而具体矿物元素在不同孔尺度中的作用方向和显著性存在差异。部分矿物元素虽在模型构建中表现出较高的重要性,但其标准化回归系数不显著,说明其更多通过影响气化反应速率、孔壁稳定性或局部烧蚀行为等间接途径参与孔结构演化,而非直接控制特定孔体积参数。这种间接调控作用进一步增强了孔结构形成过程的复杂性。

综合 PLSR 模型结果可归纳出生物炭孔结构调控的若干经验性规律:低灰分、高纤维素生物质更有利于获得高比表面积、以微孔为主的孔结构;富含碱金属元素的生物质易促进孔隙扩展,但过高含量可能导致介孔结构不稳定;较高木质素和碳含量有助于形成致密碳骨架,但不利于孔径的进一步放大。上述规律可为生物炭原料的工程筛选提供参考。

3 结论

(1) 基于 PLSR 模型,建立了生物质多维理化性质参数与生物炭孔结构之间的定量关联关系,实现了在多变量共线性条件下对孔结构形成规律的系统

解析。

(2)PLSR 分析结果表明,不同孔结构参数对生物质理化性质的响应具有显著差异,孔结构形成难以由单一因素主导;VIP 与标准化回归系数的联合分析有效区分了对孔结构具有直接控制作用的关键变量与作用不稳定或间接影响的非显著变量。

(3)生物炭孔结构的演化由碳骨架生成特征与无机矿物组分协同决定,其中碳骨架相关性质控制孔结构的基础形态,而矿物组分通过调节气化强度影响孔隙的扩展与稳定性,这一认识为基于原料特性的孔结构定向设计提供了依据。

参考文献

- [1] Wang Q, Luo B, Wang Z, *et al.* Pore engineering in biomass-derived carbon materials for enhanced energy, catalysis, and environmental applications[J]. *Molecules*, 2024, 29(21): 5172.
- [2] Johannes L, Stephen J. Forest Policy and Economics. Biochar for environmental management: Science and technology[M]. London: Routledge, 2009: 448.
- [3] 赵晓玲, 曾丹林, 黄刚, 等. 生物质多孔碳的制备、掺杂及应用[J]. *化工新型材料*, 2023, 51(7): 49-54.
- [4] 韩婉祺, 刘蕾, 成洁, 等. 4 种典型林业剩余物基生物炭理化性质对不同热解温度的响应[J]. *林业科学*, 2025, 61(11): 138-149.
- [5] Ate S A. Investigation of physicochemical and chemical properties of biochar activated with carbonate, nitrate, and borohydride[J]. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 2025, 15(2): 2397-2407.
- [6] Roy S, Kumar U, Bhattacharyya P. Synthesis and characterization of exfoliated biochar from four agricultural feedstock[J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2019, 26(7): 7272-7276.
- [7] 朱胜. 生物炭修复土壤重金属污染的研究进展[J]. *现代化工*, 2023, 43(12): 60-63, 68.
- [8] Jalali M, Panam Z, Jalali M, *et al.* The impact of feedstock type and pyrolysis parameters on the physical and chemical properties of biochars for sorption, agricultural and carbon sequestration applications: A meta-analysis[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2025, 192: 107271.
- [9] Gholizadeh M, Meca S, Zhang S, *et al.* Understanding the dependence of biochar properties on different types of biomass[J]. *Waste Management*, 2024, 182: 142-163.
- [10] Chinonso O, Steve R, Tom S. Feedstock nitrogen content mediates maximum possible Pb sorption capacity of biochars[J]. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 2023, 25(12): 2102-2109.
- [11] Liu J, Chen X, Chen W, *et al.* Biomass pyrolysis mechanism for carbon-based high-value products[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2023, 39(3): 3157-3181.
- [12] Lin H, Huang Y, Jin Q, *et al.* Effects of biomass components and pyrolysis temperature on the adsorption properties of biochar for heavy metals: a review[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2025, 192: 107321.
- [13] Ban S E, Lee E J, Yoon J, *et al.* Role of cellulose and lignin on biochar characteristics and removal of diazinon from biochar with a controlled chemical composition[J]. *Industrial Crops and Products*, 2023, 200: 116913.
- [14] Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: A basic tool of chemometrics[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2001, 58(2): 109-130.
- [15] Galindo-Prieto B, Mudway I S. A review of the applications and challenges of applying partial least squares (PLS) to exposomics research[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2026, 1383: 344826.
- [16] Mahieu B, Qannari E M, Jaillais B. Extension and significance testing of variable importance in projection (vip) indices in partial least squares regression and principal components analysis[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2023, 242: 104986.
- [17] Olivieri A C. Introduction to multivariate calibration: A practical approach[M]. Cham: Springer International Publishing, 2024: 119-137.
- [18] 吴丹焱, 辛善志, 刘标, 等. 基于木质素部分脱除及其含量对生物质热解特性的影响[J]. *农业工程学报*, 2018, 34(1): 193-197.
- [19] Wang Y, Uemoto M, Ueki Y, *et al.* Effects of inherent ash particles on the powdered biochar structure evolution in H₂O and CO₂ gasification[J]. *Journal of the Energy Institute*, 2025, 119: 101941.
- [20] de Oliveira P I, de Moraes E G, Jindo K, *et al.* Biochar N content, pools and aromaticity as affected by feedstock and pyrolysis temperature[J]. *Waste and Biomass Valorization*, 2024, 15(6): 3599-3619.
- [21] 张珂, 林琳, 张健, 等. 生物质碳材料孔隙结构及调控方法研究进展[J]. *化工新型材料*, 2023, 51(8): 48-54.
- [22] 周丹丹, 马芷萱, 贺环, 等. 硅对生物炭稳定性及其吸附/降解污染物的影响机制[J]. *环境化学*, 2025, 44(9): 3426-3433.
- [23] 吴晓梅, 叶美锋, 吴飞龙, 等. 农林废弃物生物炭的制备及其吸附性能[J]. *生物质化学工程*, 2023, 57(4): 27-33.
- [24] Yang F, Gao P, Chi L, *et al.* Enhancement of biochar carbon sequestration through mineral regulation: Effects and mechanisms[J]. *Agronomy*, 2025, 15(4): 943.
- [25] Yu W, Lee S J, Cho H. Partial least squares regression trees for multivariate response data with multicollinear predictors[J]. *IEEE Access*, 2024, 12: 36636-36644.
- [26] Mian M M, Ao W, Deng S. Sludge-based biochar adsorbent: Pore tuning mechanisms, challenges, and role in carbon sequestration[J]. *Biochar*, 2023, 5(1): 83.
- [27] Jiang T J, Morgan H M, Tsai W T, *et al.* Thermochemical conversion of biomass into biochar: Enhancing adsorption kinetics and pore properties for environmental sustainability[J]. *Sustainability*, 2024, 16(15): 6623.
- [28] Halim N, Tajima A, Asano S, *et al.* Change in catalytic activity of potassium during CO₂ gasification of char[J]. *Energy & Fuels*, 2019, 34(1): 225-234.
- [29] Zheng Q, Li Z, Guo T, *et al.* Unraveling the synergistic development of carbon skeleton and pore networks involved in lignin pyrolysis[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2023, 170: 105912. ■