

综述与专论

DOI: 10.11949/0438-1157.

人工智能辅助沼气重整催化体系筛选与优化研究进展

黄泽涛, 韩冰, 张止戈, 谭涛, 谢君, 陈勇

(华南农业大学生物质学院, 广东 广州 510642)

摘要: 沼气重整可将 CH_4 和 CO_2 转化为 H_2/CO 比可调的合成气, 是生物质碳资源高值利用的重要路径。受原料组成波动、杂质扰动、积碳烧结耦合失活及长期稳定性评价不足制约, 催化剂设计面临多变量、多目标优化问题。本文从建模需求出发, 综述沼气干重整、蒸汽重整与双重重整催化体系及失活规律, 总结结构化数据构建、描述符选择、模型筛选、工况优化和多目标决策进展, 并讨论人工智能与理论计算、原位表征和机理分析协同的路径。未来应明确数据来源与适用边界, 建立数据、模型、机理和实验闭环迭代流程。

关键词: 沼气重整; 催化剂; 人工智能; 机器学习; 数据治理

中图分类号: TQ032.4; TQ426

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-16

Research progress on artificial intelligence-assisted screening and optimization of catalysts for biogas reforming

HUANG Zetao, HAN Bing, ZHANG Zhige, TAN Tao, XIE Jun, CHEN Yong

(College of Future Biomass, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, Guangdong, China)

Abstract: Biogas reforming converts CH_4 and CO_2 into syngas with tunable H_2/CO ratios, offering a route for upgrading biomass-derived carbon resources. Catalyst design remains challenging because feedstock composition, trace impurities, coke formation, sintering, and long-term stability are strongly coupled. This review summarizes catalyst systems and deactivation features in biogas dry reforming, steam reforming, and bi-reforming from a modeling-oriented perspective. It further discusses structured data construction, descriptor selection, model screening, operating-condition optimization, and multi-objective decision-making, with emphasis on evidence levels that distinguish direct biogas data from transferable studies on related reforming systems. Feasible integration of artificial intelligence with theoretical calculations, in situ characterization, and mechanistic analysis is also examined for rational catalyst design. Future work should define data sources and applicability boundaries clearly and develop workflows linking data, models, mechanisms, and experiments.

Keywords: biogas reforming; catalyst; artificial intelligence; machine learning; data governance

引言

我国每年沼气生产潜力超过 1200 亿立方米^[1],

其主要组分为 CH_4 (55%~70%) 和 CO_2 (30%~45%)。在完成净化、稳压、供热和过程匹配的条件下, CH_4 和 CO_2 可经催化重整转化为 H_2/CO 比可调的合成

收稿日期: 2026-04-22 修回日期: 2026-06-03

通信作者: 谢君 (1965—), 男, 博士, 教授, xiejun@scau.edu.cn; 陈勇 (1957—), 男, 博士, 研究员, chen-yong@scau.edu.cn

第一作者: 黄泽涛 (1997—), 男, 博士研究生, huangzetao@stu.scau.edu.cn; 韩冰 (1997—), 男, 博士研究生, hanbing@stu.scau.edu.cn

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2023YFC3905802)

引用本文: 黄泽涛, 韩冰, 张止戈, 谭涛, 谢君, 陈勇. 人工智能辅助沼气重整催化体系筛选与优化研究进展[J]. 化工学报, XXXX, XX(X): 1–16

Citation: HUANG Zetao, HAN Bing, ZHANG Zhige, TAN Tao, XIE Jun, CHEN Yong. Research progress on artificial intelligence-assisted screening and optimization of catalysts for biogas reforming[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(X): 1–16

气,为分布式制氢、平台合成气制备及平台化学品路线提供可再生碳源选项^[2-5]。与化石天然气相比,沼气具有来源分散、碳循环属性突出以及与农业废弃物、畜禽养殖废弃物和污泥处理过程耦合紧密等特点,但其资源禀赋也决定了相关技术路线必须结合原料半径、气体净化、装置规模和下游需求进行场景化评价。

相较于天然气或纯组分甲烷重整,沼气重整面临更复杂的反应和工程约束。真实沼气中 CH_4/CO_2 比、水分含量、 H_2S 、硅氧烷及其他微量杂质会随发酵原料、运行温度和工艺条件显著波动,单一固定工况下的催化剂评价难以覆盖实际运行场景。甲烷干重整(Dry Reforming of Methane, DRM)、甲烷蒸汽重整(Steam Reforming of Methane, SRM)与双重重整(Bi-Reforming of Methane, BRM)在供热负荷、 H_2/CO 调控和积碳风险方面存在差异,对活性位结构、载体稳定性、抗中毒能力和长期失活控制提出不同要求^[6-7]。催化剂设计目标也由单一初始转化率逐步转向转化率、低积碳、抗烧结、长寿命、低成本、杂质耐受和工艺可行性之间的综合平衡^[2,8-10]。

人工智能(Artificial Intelligence, AI)方法为沼气重整催化剂研究提供了新的数据整理和实验决策工具。AI可将散落于正文、图表、补充信息和表征结果中的异构信息整理为结构化数据,并在材料组成、结构特征、反应条件和性能响应之间建立候选排序、条件优化和不确定性评估模型^[11-15]。然而,直接面向沼气重整催化剂的AI原始研究仍然有限,现阶段许多认识主要来自DRM、SRM、BRM及相邻催化体系的方法迁移。因此,应区分直接沼气或模拟沼气数据、相邻体系研究和通用AI方法。

基于此,本文在梳理重整路线、催化体系和失活规律的基础上,重点归纳人工智能在沼气重整催化剂研究中的已有进展,包括结构化数据构建、描述符选择、候选排序、反应条件优化、多目标决策以及与密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)、原位表征和机理分析的耦合路径;同时明确直接面向沼气重整对象的研究与来自相邻体系的方法迁移之间的边界,并讨论当前瓶颈、模型可信度和后续发展方向(图1)。

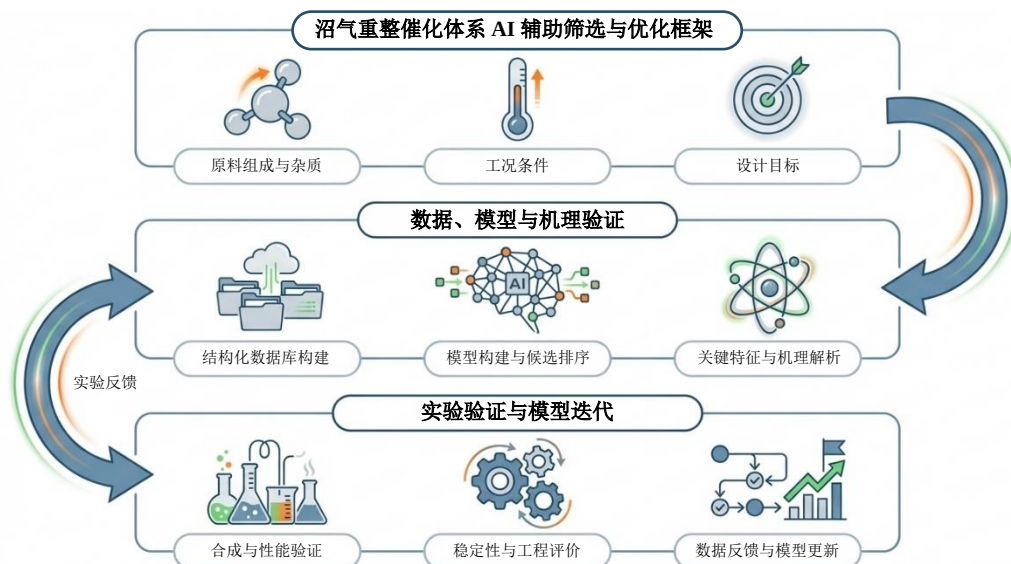


图1 人工智能辅助沼气重整催化剂筛选、优化与适用边界研究框架

Fig. 1 Framework for artificial-intelligence-assisted screening and optimization of biogas reforming catalysts and assessment of applicability boundaries

1 面向建模的沼气重整催化体系分析

1.1 重整路径与产物导向的设计约束

沼气重整技术路径选择的关键在于识别不同

路径在热力学窗口、产物导向和工程负担上的差异,为催化剂设计提供约束条件和评价标准。DRM直接利用 CH_4 与 CO_2 共转化,原料匹配度高且兼具碳资源协同利用属性,但该反应为强吸热反应,通常需要 $700\sim 900\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的反应温度,产物 H_2/CO 接近1,

可作为合成气路线的候选进料;SRM通过引入水蒸气提高H₂产率,H₂/CO可达3以上,适用于制氢导向过程,但需考虑蒸汽供给和载体水热稳定性;BRM兼有CO₂与H₂O参与,可在一定范围内将H₂/CO调至接近2,为甲醇合成气等目标产物提供可调控路线^[16-18]。三条路线的反应特征与工程约束比较见表1和图2。

路线选择的评价重点正在由单一初始转化率转向目标产物和运行稳定性。面向甲醇合成气的

研究更关注H₂/CO≈2的稳定输出,以及CO₂/H₂O协同活化对积碳的缓解作用;面向制氢过程的研究则更关注H₂收率、蒸汽利用效率和能源—经济—环境综合表现^[7,18-19]。因而,反应路线并非催化剂设计的外部前置条件,而是影响描述符选择、目标函数设定和稳定性评价标准的重要变量。相邻领域的技术经济评价研究亦表明,催化剂设计须与原料可得性、供热方式和系统成本协同考量,孤立的材料层面优化往往难以直接转化为系统层面的竞争力^[20]。

表1 沼气重整主要路线的反应特征与工程约束比较

路线	主反应	H ₂ /CO	反应温度/℃	产物导向	主要工程约束	积碳风险
DRM	CH ₄ +CO ₂ →2CO+2H ₂	≈1	700~900	合成气/化工原料	高温供热,积碳严重	高
SRM	CH ₄ +H ₂ O→CO+3H ₂	≈3	600~850	富氢气体/制氢	蒸汽供给,水热稳定性	中等
BRM	3CH ₄ +CO ₂ +2H ₂ O→4CO+8H ₂	≈2	650~900	甲醇合成气	多变量耦合控制	较低

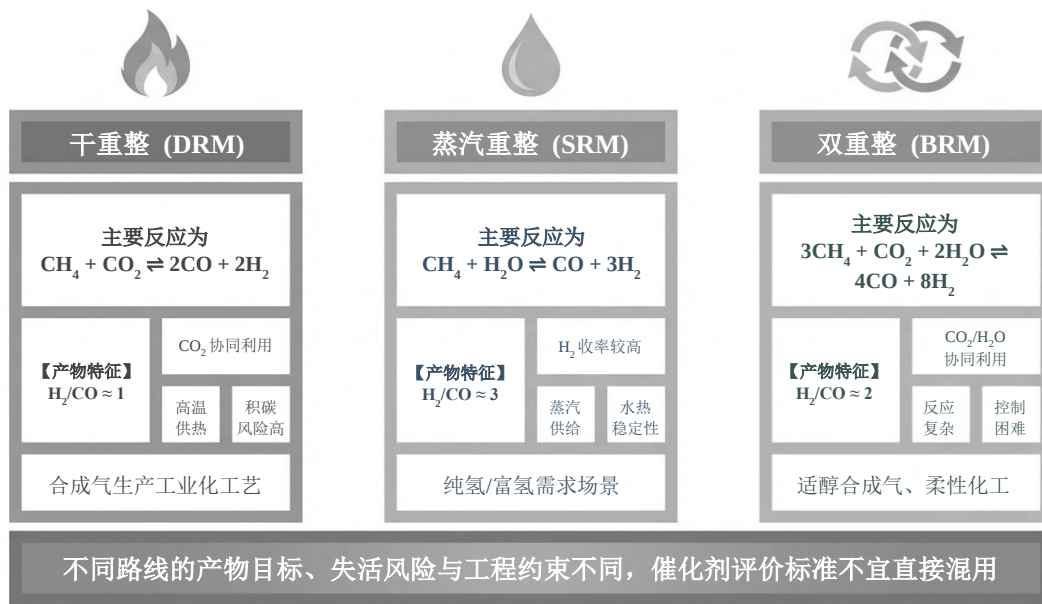


图2 沼气干重整、蒸汽重整与双重重整技术路径对比

Fig. 2 Comparison of dry reforming, steam reforming and bi-reforming pathways for biogas conversion

不同路线下获得的“高活性”或“高稳定性”结果不宜直接横向排序。DRM中的高CO₂利用率与SRM中的高H₂收率分属不同评价体系,二者的反应网络、热力学极限和失活机制均存在差异;BRM中的H₂/CO调控也不宜与单一路线的瞬时转化率并列。对后续建模而言,应先明确产品目标和过程约束,再讨论在给定目标函数下何种路线与催化剂组合更具优势,避免将不同评价体系下的数据混入同一预测模型。

1.2 Ni基催化剂的载体与助剂调控

Ni基催化剂是沼气重整研究中应用最广泛的

活性组分,兼具C—H键活化能力强、成本可控和载体/助剂调控经验丰富等优势,相关文献积累最为充裕^[18,21-22]。当前制约Ni基催化剂进一步发展的关键瓶颈已非初始活性本身,而在于如何将高初始活性转化为长周期可维持的稳定性。围绕这一目标,载体调控和助剂工程构成两条主要调控路径。

在载体调控方面,不同载体为Ni活性位提供差异化的支撑功能。稀土金属氧化物(如CeO₂、La₂O₃、Pr₆O₁₁)主要通过提升表面碱性和增强氧迁移能力发挥作用,其特殊的电子结构赋予了优异的储放氧与氧化还原循环特性。以CeO₂为例,Ce³⁺/Ce⁴⁺循环可

为表面碳物种的氧化清除提供活性氧^[23]。La₂O₃的三维有序大孔结构有助于改善传质并稳定 Ni 颗粒^[24]。碱土金属氧化物(如 MgO、CaO)侧重于调节表面酸碱性以抑制积碳, MgO 与 NiO 可形成 NiO-MgO 固溶体, 增强金属—载体相互作用并提高热稳定性^[25-26]。介孔硅基材料(SBA-15、MCM-41)则利用有序孔道的限域效应稳定 Ni 纳米颗粒、抑制烧结, 但水热条件下孔道存在坍塌风险^[27-28]。此外, 羟基磷灰石在强化 CO₂ 吸附与活化方面表现突出, 但其高温热稳定性尚需进一步考察^[29]; SiC 载体兼具高热导率和化学惰性, 有利于微波辅助加热场景^[30-31]。

在助剂工程方面, 缺陷工程与复合氧化物网络的设计思路更强调氧空位、界面结构与碳清除路径之间的协同。La 掺杂 Ni/CeO₂ 体系通过增加 CeO₂ 表面氧空位浓度促进 CO₂ 活化并提升抗积碳能力^[23]; Nd₂Zr₂O₇ 载体上 Ni⁰ 与氧空位的协同效应有效抑制了碳沉积^[32]; ZrO₂ 助剂通过构建 Ni-NiO-ZrO₂ 网络结构改善了低温 DRM 性能^[33]; 煤气化渣衍生载体则利用多组分协同功能化实现了 Ni 催化剂的高稳定性^[34]。此外, Ru/CeO₂-Al₂O₃ 在 BRM 中表现出较长时间稳定运行能力, 也说明储氧特性与抗烧结能力的协同对稳定性控制具有重要意义^[19]。

上述调控策略可进一步转化为模型所需的材料描述符和结构描述符。活性金属负载量、Ni 粒径、载体类型、比表面积、孔径分布、表面碱性、氧空

位浓度、还原温度、Ce³⁺/Ce⁴⁺ 比例、金属—载体相互作用强度和助剂种类等, 均可作为候选筛选的输入特征; CH₄ 转化率、CO₂ 转化率、H₂/CO 比、积碳量、失活速率和稳定运行时间可作为输出标签。需要注意的是, 载体变化往往同步影响金属分散、还原行为、氧空位形成和表面酸碱性, 助剂引入也可能同时改变 CO₂ 活化、积碳路径和局部热稳定性^[35]。因此, 描述符设计应尽可能保留变量间的耦合关系, 而不是仅依赖单一物性参数。

1.3 贵金属、双金属与多金属催化体系

相较于 Ni 基催化体系, 贵金属、双金属和多金属体系的研究重点在于通过界面电子结构调控和多组分协同, 解决单一 Ni 体系在积碳抑制、烧结延缓和产物比调控方面的局限。Pt、Ru、Rh 等贵金属能够降低 CH₄ 活化能垒、增强表面消碳能力并提高高温下的颗粒稳定性, 但其成本和资源约束决定了其更适合作为少量改性组分, 而不是直接替代 Ni 基催化体系^[17-18, 36-37]。具体而言, Pt-Ni 双金属体系通过 SMSI 兼顾了活性与稳定性^[17]。CeO₂ 纳米棒负载 Ni-Co 双金属体系通过提升金属分散度和 SMSI 改善了稳定性^[38]; Pr 的引入改变了 Ni/Al₂O₃ 的可还原性与表面电子状态^[39]; Rh、La、Sm、Au 对 Ni/Al₂O₃ 的协同调控亦通过分散度与界面电子结构调控改善了催化活性和抗积碳能力^[40]。

表 2 沼气重整催化剂体系的关键设计变量与适用导向

Table 2 Key design variables and application orientation of biogas reforming catalyst systems

催化剂体系	组成示例	可结构化设计变量	关键性能或目标	适用导向
Ni 基单金属体系	Ni/CeO ₂ ^[23] 、Ni/La ₂ O ₃ ^[24]	Ni 负载量、粒径、载体碱性、氧空位、还原温度、比表面积	CH ₄ /CO ₂ 转化率、H ₂ /CO 比、积碳量、失活速率	DRM/BRM 基础体系, 适合建立结构-性能关系
Ni 基双金属/合金体系	Ni-Co/CeO ₂ ^[35]	第二金属种类、合金化程度、电子结构、SMSI 强度	抗积碳、抗烧结、H ₂ /CO 调控、长期稳定性	BRM 及高稳定性场景, 可用于多组分协同优化
Ni 基多助剂/复合氧化物体系	Ni/MgO-Al ₂ O ₃ ^[26] 、Ni/Nd ₂ Zr ₂ O ₇ ^[32]	助剂种类、复合氧化物比例、氧迁移能力、酸碱位分布	CO ₂ /H ₂ O 活化能力、碳清除速率、结构稳定性	DRM 高温场景和强抗失活需求场景
贵金属强化体系	Pt-Ni ^[17] 、Ru/CeO ₂ -Al ₂ O ₃ ^[19] 、Rh/Ni/Al ₂ O ₃ ^[37]	贵金属种类与含量、界面结构、分散度、成本约束	低温活化、抗烧结、单位贵金属效率、经济性	高附加值与成本容忍场景, 不宜简单作为大规模替代方案
多金属/高熵体系	(Ce _{0.2} La _{0.2} Pr _{0.2} Sm _{0.2} Y _{0.2})O _{2-δ} 负载 Ru ^[39]	元素组成、构型熵、氧空位分布、多功能位点数量	高温结构稳定性、复杂工况适应性、多目标综合表现	复杂工况探索, 仍需进一步工程验证

高熵氧化物载体是近年新兴的研究方向。(Ce_{0.2}La_{0.2}Pr_{0.2}Sm_{0.2}Y_{0.2})O_{2-δ} 负载 Ru 体系借助构型熵效应和多元稀土协同, 在长时高温运行中展现出结构稳定性和多功能位点优势^[39]。此外, Li-Ni-Al 体系中 Li 的引入方式、Ni/MgO-Al₂O₃ 在 DRM 与 BRM 中的表现差异、以及介孔或微孔硅基载体与多元元素助

剂的协同, 均表明所谓“最佳催化剂”本质上是材料、工况与目标函数相匹配的系统最优解^[26, 28, 41]。

此外, 部分工作还探索了金属有机框架(Metal-Organic Frameworks, MOFs)衍生材料、反应器—催化剂协同以及半导体结驱动等方向^[42-47]。对沼气重整而言, 这类研究的意义主要在于为低温或局域强

表3 催化剂设计变量与性能响应的耦合关系

Table 3 Coupling relationships between catalyst design variables and performance responses			
变量层级	典型字段	对应目标或标签	建模注意事项
路线与产品导向	DRM、SRM、BRM; H ₂ /CO 目标; CO ₂ /H ₂ O 比	产品适配性、H ₂ /CO 比、能耗边界	不同路线应先定义任务,再决定是否合并数据
材料组成	活性金属、负载量、载体、助剂、贵金属含量	初始活性、成本、抗失活潜力	组成变量需与制备和工况变量共同解释
结构与表征	粒径、比表面积、孔结构、氧空位、酸碱性、CH ₄ /CO ₂ 活化、碳清除能力、结构稳定性	还原温度	图谱和表征标签需统一采集时点和处理方式
反应工况	温度、空速、压力、CH ₄ /CO ₂ /H ₂ O 比、预处理条件	转化率、选择性、H ₂ /CO 比、积碳速率	强条件敏感体系中工况变量不可省略
失活与工程因素	运行时长、积碳量、烧结程度、H ₂ S/硅氧烷中毒、压降、再生性能	稳定性、寿命、工程适配性	可作为优化目标、惩罚项或硬约束

化条件下的催化设计提供补充思路,其普适性和工程可放大性仍有待进一步验证^[31,48-49]。

1.4 失活机制与稳定性评价

积碳与烧结是沼气重整催化剂的两大主导失活路径,二者并非相互孤立,而是与金属粒径、界面电子态、氧迁移能力及工况窗口等因素相关^[26]。就机理而言,积碳主要源于CH₄深度脱氢与CO歧化(Boudouard 反应),其速率和碳物种分布受反应温度、金属粒径及表面酸性共同控制;烧结则因纳米颗粒在高温下经 Ostwald 熟化或迁移聚并而使活性面积持续衰减,与金属—载体相互作用强度及载体热稳定性直接相关。促进CO₂/H₂O 活化、构建氧空位并强化SMSI,通常有助于同时抑制积碳和延缓烧结^[23,32,50]。

DRM 领域的研究进一步表明,抗积碳与抗烧结能力并非由单一变量决定,而是还原性、表面碱性、

氧迁移和孔结构等多因素共同作用的结果。Y 助剂调控的Co/Al₂O₃双峰孔结构、Ce 掺杂Ni/MgO 调控及稀土氧化物Ni-M-Al 体系的研究均支持这一判断^[51-54]。然而,上述规律大多建立在特定温度、进料比和测试时长条件下,其跨体系适用性仍需在沼气或模拟沼气条件下进一步验证。

在BRM 与SRM 研究中,稳定性还表现出明显的目标依赖性。Ni/CeO₂/水滑石衍生体系通过CO₂/H₂O 活化与Ce 氧化还原循环兼顾适用于甲醇合成的H₂/CO 比输出与活性调控^[16];Ni-Pr/水滑石衍生体系在模型沼气SRM 中获得较高的甲烷转化和产氢率^[55];Ni-Fe 单原子合金在氧参与DRM 中于较温和条件下缓解了积碳^[56]。上述结果表明,“低积碳率”并不自动等同于“高稳定性”,稳定性判断须同时绑定测试时间、进料条件、表征证据和目标产物要求。

表4 沼气重整催化剂主要失活路径与调控要点

Table 4 Major deactivation pathways and mitigation strategies for biogas reforming catalysts				
失活路径	主要触发因素	典型表现	调控要点	评价建议
积碳	高温CH ₄ 解离, Boudouard 反应	丝状碳/包覆碳沉积,活性位覆盖	增强氧迁移,调控碱性,优化CH ₄ /CO ₂ 比	需采用热重分析(Thermogravimetric Analysis, TGA)和拉曼光谱明确积碳物种,并注明测试时长
烧结	高温,弱金属—载体作用	粒径增大,活性面积下降	SMSI 强化,限域,合金化	需对比反应前后的透射电子显微镜(Transmission Electron Microscopy, TEM)和X 射线衍射(X-Ray Diffraction, XRD)结果
中毒	H ₂ S、硅氧烷等杂质	活性位不可逆毒化	脱硫预处理,耐毒位点设计	真实沼气条件下验证
相变/氧化	水热条件,氧化性气氛	活性金属氧化,载体相变	维持还原性气氛,强化载体热稳定性	采用原位XRD 和X 射线光电子能谱(X-Ray Photoelectron Spectroscopy, XPS)跟踪

综上所述,当前的沼气重整催化体系研究文献数据仍存在三类缺口:(1)真实沼气中H₂S、硅氧烷等杂质对催化剂寿命的系统证据不足,多数研究仍采用仅含CH₄和CO₂的模拟沼气;(2)稳定性测试时长、判据和表征口径差异较大,跨体系比较困难;(3)贵金属体系的成本、供给约束和大规模适用性

仍需单独评估^[7]。相关重整体系的界面和粒径规律有助于解释可迁移机理,但不能替代沼气重整条件下的工程验证^[57-59]。主要失活路径与调控要点归纳于表4。

为了使稳定性评价能够用于模型训练和候选排序,失活机制需要转化为可记录的标签体系。除

常规转化率和选择性外,建议记录运行时长、单位时间失活率、反应前后金属粒径变化、积碳量、碳物种类型、 H_2S 或硅氧烷暴露浓度、再生后活性恢复率以及压降变化等字段。上述字段既可作为稳定性预测标签,也可作为候选筛选中的惩罚项或约束项。若缺少反应后表征和长期测试,模型对“高稳定性”的判断仅适用于前期筛选。

2 数据基础与描述符构建

2.1 数据来源与证据层级

对沼气重整催化体系而言,数据基础的薄弱往往比算法选择更早决定结论边界。当前稀缺的并非文献数量,而是可直接进入建模与决策的结构化数据。现有文献报道虽数量可观,但大量数据散落于文本段落、图表标注和补充信息中,格式各异、字段不统一,难以直接用于模型训练。相关数据至少包括五类信息:文献元数据、实验过程数据(材料组成、制备方法、反应工况、性能指标)、表征数据(XRD、XPS、TEM、TPR等)、计算与机理数据(DFT能量、吸附构型、反应路径)以及过程与系统层数据(过程模拟、技术经济评价、生命周期评价)^[7,11-12,60]。若不区分这些信息来源,活性预测、稳定性分析和候选生成便容易混用不兼容数据。

不同来源的数据应服务于不同强度的论断。直接来自沼气重整或模型沼气体系的实验数据,更适合支撑材料优劣、 H_2/CO 调控和稳定性比较;一般DRM、SRM、BRM及相邻甲烷重整体系数据,可用于解释可迁移机理、构建描述符和形成候选假设,但其直接适用于沼气重整场景的程度需谨慎评估;AI、知识图谱和科学智能体文献则主要承担数据整理、模型流程和实验决策方法参考功能,不宜直接承载沼气重整催化剂性能结论^[14-15,61]。因此,后续数据驱动研究应在结论表述中明确数据来源和适用范围。

2.2 描述符体系与目标定义

沼气重整催化剂的性能预测通常涉及三类描述符。第一类为材料与结构描述符,如活性金属种类与负载量、载体类型、掺杂元素、比表面积、孔径分布、还原温度、表面碱性和氧空位浓度等;第二类为工况描述符,如反应温度、 $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ 进料比、气时空速(GHSV)、压力、停留时间及预处理条件;第三类为失活与机理描述符,如反应后积碳量、碳物种分布、Ni粒径变化、SMSI强度以及 $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$ 氧化还原循环特征^[8,62-63]。只有在变量定义、量纲和测试口径统一的前提下,这些描述符才可构成可比较的特征空间。

与一般材料性能预测不同,沼气重整必须采用多目标标签体系。单一 CH_4 或 CO_2 转化率难以代表真实决策需求,研究者需同时关注 H_2/CO 比、积碳倾向、稳定时间和系统层指标^[7,16,18]。数据集建设的关键不只是扩大样本,更在于先定义清楚任务对象:是在特定工况下预测活性,还是评估跨工况稳定性;是做单因素筛选,还是做材料与条件的联合优化。任务定义的模糊性往往比数据量不足更严重地制约模型有效性。

2.3 数据治理与文献知识抽取

该领域的基础短板在于报告标准不统一和关键背景信息缺失。在催化体系类文献中,煅烧与还原条件、气体流量、稳定性测试方法及反应器信息常存在缺失或表述不一致的问题^[11]。具体而言,一是催化剂煅烧、还原及其他预处理条件记录不完整;二是稳定性测试时长、失活判据和取样频率缺乏统一口径;三是积碳表征方法、碳物种分类及数据采集时点差异较大。上述问题不仅降低了模型输入数据的质量,也使结果解释和跨文献比较缺乏可靠基础。各数据层级的关键字段与治理重点见表5。

大语言模型(Large Language Model, LLM)、知识

表5 沼气重整催化剂研究中数据来源、关键字段与治理重点

Table 5 Data sources, key fields and governance priorities in biogas reforming catalyst research

数据层级	主要字段举例	常见缺失/不一致问题	治理重点	建模用途
材料组成	活性金属、负载量、载体、助剂	负载量实际值与标称值偏差	统一计量方式	特征变量
制备条件	煅烧温度、还原条件、前驱体	预处理细节缺失	完整记录制备流程	特征变量
工况参数	温度、空速、 $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ 比、压力	空速定义不统一,流量缺失	标准化报告格式	特征/条件变量
性能数据	转化率、选择性、 H_2/CO 比	取样时间不一,平衡态判据差异	明确取样条件和计算方式	标签变量
稳定性数据	运行时间、失活速率、积碳量	时长差异大,判据不统一	统一稳定性测试规程	标签变量(关键)
表征数据	XRD、TEM、XPS、TPR、TGA-Raman	格式不一,标注缺失	标准化图谱格式与标签	多模态输入

图谱和智能体可用于文献抽取和信息整理(图3),但不能自动消除原始数据偏差。相关智能体可将散落于正文和图注中的反应条件、催化剂组成和性能信息整理为结构化表格^[12,15];知识图谱可辅助术语对齐和关系组织;领域微调模型有助于提高抽取精度^[64]。若要支撑催化剂辅助设计,仍需按任务建立分层基准数据集:对象内预测使用直接沼气或模拟沼气数据集,迁移学习使用一般DRM数据集,方法比较使用AI任务数据集。

须避免“样本越多越好”的简单思路。对沼气

重整这种强条件敏感体系,若样本规模扩大却未同步保证字段一致、工况可比和研究对象一致,数据集越大反而越容易掩盖真实规律。更合理的建设路径应先围绕明确任务形成小而可信的数据子集,确保每条记录字段完整、可溯源且实验条件可比,再逐步扩展到跨路线和跨实验室的数据联通。在此过程中,数据溯源和版本管理同样重要:每条记录应能追溯至原始文献的具体表格或图表,同时应建立数据质量评分机制以标注各条记录的可信程度。

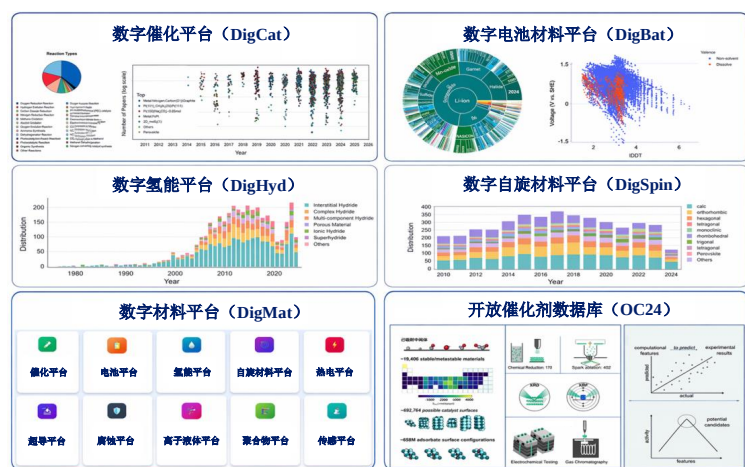


图3 从数据库到结构化知识的材料数据组织架构^[14]

Fig. 3 Architecture for organizing materials data from databases to structured knowledge^[14]

3 AI辅助催化剂筛选与条件优化

3.1 主要方法与适用任务

就目前文献积累看, AI相关研究尚未在沼气重整催化剂领域形成与其他催化体系相当的实证规模, 但已有工作可按研究对象和用途分为四类: 一是直接面向沼气重整或模拟沼气体系的筛选、优化与验证研究, 此类工作最能反映AI在该对象中的实际作用, 但数量仍然有限; 二是围绕DRM、SRM及相关重整体系开展的数据驱动研究, 此类工作不能直接替代沼气重整研究, 但可为变量选择、模型构建和验证设计提供参考; 三是面向其他催化材料发现问题的AI方法研究, 主要提供候选生成、排序、解释和实验协同方法; 四是借助文献挖掘、生成式模型和智能体开展的信息整理研究, 主要服务于数据库构建与知识组织^[13,65-67]。相邻领域中, AI在化学逆合成和酶工程中的应用已展示出“候选生成—实验验证—结果反馈”式流程的可迁移价值^[68-69]。从方法

演进的角度看, 催化剂研发流程的变化如图4所示。

从已发表研究看, AI在该领域的实际应用主要集中在四个环节: 文献与实验数据的结构化整理、催化剂组成或载体/助剂组合的候选排序、反应条件优化, 以及模型预测与实验回流的初步衔接。在当前小样本、高异质且强调可解释性的条件下, 随机森林(Random Forest, RF)、梯度提升决策树(Gradient Boosted Decision Trees, GBDT)、支持向量机(Support Vector Machine, SVM)和高斯过程(Gaussian Process, GP)等传统模型通常更适合候选排序和趋势识别, 对数据量要求较低且多具备一定可解释性; 仅在结构表示复杂、样本规模较大或需要跨模态表示时, 图神经网络和深度学习方法才更具优势^[65-66]。与数据相对丰富的其他催化场景相比, 沼气重整领域的突出特点不是算法类型不足, 而是直接可用的数据规模小、稳定性与失活标签口径不统一、跨实验室验证代价高。不同AI方法与具

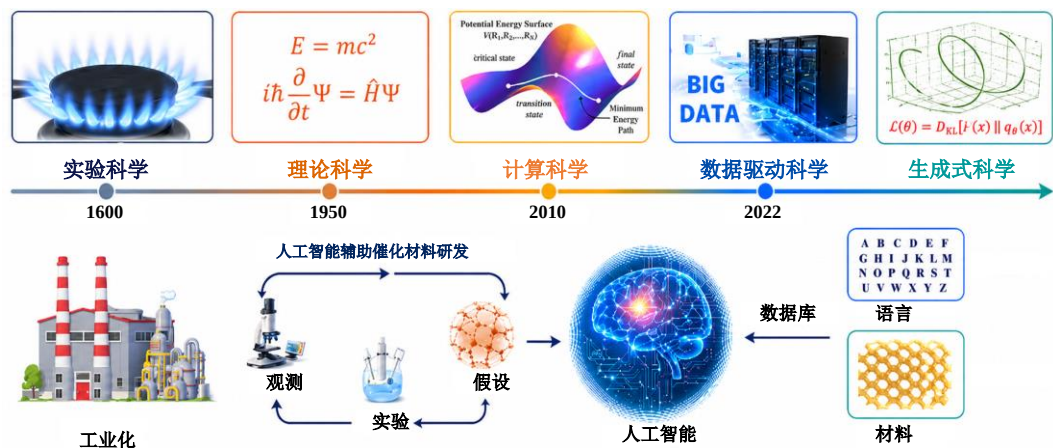


图4 催化剂研发流程演进示意图^[70]

Fig. 4 Schematic evolution of the catalyst research and development workflow^[70]

体任务的对应关系见表6。表6涉及的其他方法包括支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)、人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)、贝叶斯优化(Bayesian Optimization, BO)、响应面法(Response Surface Methodology, RSM)、实验设计(Design of Experiments, DoE)和自然语言处理(Natural Language Processing, NLP)。

表6 人工智能方法在沼气重整催化剂设计中的适用关系

Table 6 Applicability of artificial intelligence methods in biogas reforming catalyst design

任务类型	典型方法	数据需求	主要优势	当前局限
活性/选择性预测	RF, GBDT, SVR, GP	中等规模结构化样本(>50条)	可快速建立构效关联, 具备一定可解释性	依赖特征质量与完整性, 外推能力有限
候选筛选与排序	RF, GBDT, ANN	中等规模样本, 需组成一性能配对数据	压缩高维搜索空间, 输出实验优先级列表	缺乏直接面向沼气重整体系的验证数据
条件优化	BO, RSM, DoE、主动学习	可从较小规模的初始样本启动, 但性能取决于代理模型质量和搜索空间设置	样本效率高, 适合高成本实验场景	依赖初始代理模型质量与搜索空间设定
稳定性评估	GP、生存分析、时间序列模型	长时序运行数据及失活标签	可显式纳入时间维度与失活动力学	标签口径不统一, 长时序数据匮乏
文献挖掘与知识组织	LLM, NLP、知识图谱	非结构化文本语料	高效提取与组织分散异构信息	抽取精度有待提高, 需人工复核
候选生成	生成模型、多智能体	大样本或预训练模型	可探索未知组合	生成候选的可行性和性能仍需实验验证

3.2 催化剂组成筛选与候选排序

在催化剂组成筛选方面, 当前研究已形成两条相互衔接的技术路线。一条是直接面向沼气重整目标的候选推荐, 重点围绕特定产物导向或特定工况下的催化剂配方与结构筛选; 另一条则依托相邻催化与材料发现研究, 建立可迁移的筛选逻辑和验证范式^[13, 67, 70]。前者直接相关但样本有限, 后者对象不同但方法更成熟, 两者共同构成了该领域现阶段的主要研究基础。

已有代表性工作展示了AI筛选在不同研究对象中的实施方式(表7)。Jiang等^[63]将203个Pt/氧化

物载体体系的神经网络分子动力学结果与可解释广义加性模型结合, 在177个体系上训练并以26个未见体系作泛化测试, 随后对超过10000个金属氧化物表面进行高通量筛选, 并通过BaO、CeO₂和Al₂O₃等载体的后续验证确认模型筛选结果。Sak等^[71]通过池化—解卷积策略, 在72个候选配体组成的2556种组合中, 仅以408次实验完成初筛并对高分组合进行放大验证。Hu等^[67]和Cheng等^[13]分别从能源催化与材料发现角度总结了特征工程、模型选择、解释分析与实验验证的一般流程; CO₂加氢制乙醇体系中的研究也说明, AI可提高候选筛选效率^[72]。

这些工作为沼气重整催化剂研究提供了方法参考，验证。但其结论仍需结合沼气或模拟沼气条件进行

表7 代表性人工智能应用案例

Table 7 Representative artificial intelligence application cases

文献	对象与性质	数据来源与样本规模	输入特征	预测/优化目标	模型方法	验证方式	主要结论与边界
Jiang等 ^[63]	Pt/氧化物载体抗烧结;相邻体系测试,并扩展至超过10000个金属氧化物表面	177个训练体系、26个未见载体组成、表面结构、神经网络分子动力学结果等	载体组成、表面结构、神经网络分子动力学结果等	抗烧结载体筛选和特征归因	可解释广义加性模型	文献/实验数据	说明可解释模型可用于候选排序和机制解释
Du等 ^[72]	CO ₂ 加氢制乙醇;相邻CO ₂ 转化体系	催化剂组成、制备条件和反应条件等结构化数据	组成、制备和反应条件参数	高性能乙醇合成催化剂收敛	机器学习辅助筛选	文献/实验数据	对沼气重整仅具有方法借鉴意义
Hu等 ^[67]	能源催化AI方法;方法综述	能源催化领域组成、结构、工况和性能数据	材料组成、结构描述符、反应条件和性能标签	表面反应性预测、候选筛选、解释分析	多类机器学习模型和深度学习模型	验证	可提供特征工程、模型选择和验证流程参考
Cheng等 ^[13]	材料发现AI流程;方法迁移	材料组成、结构和性能等多源数据	组成、结构、表征和性能特征	候选生成、筛选和解释	机器学习、生成式模型和材料发现流程	文献/实验数据	可为沼气重整数据库和闭环研发提供流程参考

3.3 反应条件优化与多目标协同

在沼气重整研究中,制备与反应条件优化的重要性不亚于催化剂筛选。温度、CH₄/CO₂/H₂O比、空速、预处理方式和测试时长会直接影响转化率、H₂/CO比和积碳行为。因此,仅在固定工况下比较催化剂配方,往往不足以反映其真实性能差异。围绕这一问题,实验设计、RSM和Box-Behnken设计已在沼气重整、甲烷重整等体系中得到应用,可用于量化主要工艺变量的交互作用^[55,73-74]。这类研究为后续数据驱动优化提供了较规范的变量空间和实验基础。

在此基础上,近期研究进一步引入BO等算法驱动的决策方法,以尽可能少的实验次数在高维工况空间中平衡决策效率。对沼气重整而言,优化对象已不再是单一转化率,而是同时包含CH₄转化率、CO₂转化率、H₂/CO比、积碳倾向、稳定时间及工艺适配性的多目标集合。此时更合理的结果表达方式不是给出单一“最优条件”,而是转变为帕累托前沿(Pareto Front),即不存在单一绝对最优解,只有在不同目标之间权衡取舍的一系列非支配解。研究者需要在帕累托前沿上讨论不同工况与不同催化体系的匹配关系。AI的实际价值在于将这种多目标权衡进行量化,帮助研究者在风险、收益与工艺适配的综合判断基础上确定实验优先级。

AI方法的适用边界必须通过实验验证确定。模型若要服务于沼气重整催化剂研发,至少需接受三个层面的检验:(1)跨体系验证,用于判断模型是否获得可迁移的结构-性能关系;(2)跨实验室

证,用于识别装置条件和测试习惯造成的偏倚;(3)前瞻性实验验证,用于检验模型对全新候选的推荐能力^[66,75-76]。因此,当前较可行的路径是在结构化数据、候选排序、条件搜索和实验反馈之间建立标准化流程。已有研究将多模型预测、沙普利加性解释(SHapley Additive exPlanations, SHAP)与第二代非支配排序遗传算法(Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II, NSGA-II)结合,用于面向甲醇合成气的催化剂候选推荐和条件筛选,并通过实验室尺度和中试尺度验证了所推荐PtCoCe/堇青石整体式催化剂在CH₄、CO₂转化及H₂/CO调控方面的稳定表现^[77]。该研究表明,在优化目标明确且验证路径完整的前提下,AI方法能够提高催化剂配方筛选和应用评价效率。

4 AI与反应机理的融合路径

4.1 AI-DFT耦合与反应网络建模

AI若只停留在离线相关性拟合,难以支撑催化剂筛选与优化工作。其作用取决于能否与计算、表征和反应机理判断相互印证。DFT长期以来是理解CH₄活化、CO₂活化、氧空位作用和金属-载体界面效应的核心工具,但在高覆盖度和动态重构表面条件下,静态DFT在计算代价和适用边界上均受限。预训练机器学习原子间势(Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP)有望在接近DFT精度的同时处理更接近真实催化条件的高覆盖多组分体系^[78];端到端反应网络框架则可将反应活性预测从

单个基元步骤扩展到完整反应路径^[79];分子级流量分析框架有助于将反应器层面的宏观转化回归到分子过程^[60]。

AI-DFT与原位或操作态表征的协同可按以下流程开展:首先,根据目标产品和应用场景定义优化目标,如 H_2/CO 比、积碳速率、稳定运行时间、杂质耐受性和成本约束;其次,从文献和实验中抽取催化剂组成、制备条件、反应工况、表征结果和性能标签,形成可复核的数据表;再次,利用机器学习、BO或多目标优化方法筛选候选催化剂和关键变量;随后,对高优先级候选开展DFT、MLIP或微观动力学计算,识别 CH_4 、 CO_2 、 H_2O 和积碳前驱体在动态表面的竞争吸附与反应路径;最后,采用原位漫反射傅里叶变换红外光谱(Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy, DRIFTS)、XRD、XPS、TEM、TPR和程序升温氧化(Temperature Programmed Oxidation, TPO)等原位或操作态表征手段验证模型归因,并将计算描述符、表征证据和实验结果用于下一轮候选排序。该流程旨在使模型筛选、理论计算、表征验证和实验反馈相互校正,而非以AI替代机理研究。

近期研究进一步拓展了AI-DFT耦合的深度。反应感知机器学习模拟已被用于揭示氨分解中界面协同驱动的火山型关系偏移^[80],其方法学对理解沼气重整中金属-载体界面的动态行为具有启发意义。图神经网络已实现完全绕过昂贵DFT计算直接预测高熵合金空位形成能^[81],为高通量筛选提供了新的路径。

对沼气重整而言,上述方法的意义不在于替代DFT,而在于明确“算什么、怎么算、计算结果如何回到实验”的流程。需要回答的问题包括: CH_4 、 CO_2 、 H_2O 及其中间体如何在动态表面上竞争,氧空位或氧化还原循环如何参与碳清除,以及哪些界面构型能在高温长期条件下保持结构稳定。较可行的做法是先由模型确定需要优先计算的表面构型和反应路径,再将高精度计算结果用于指导实验表征与样品设计,形成“模型筛选—计算任务确定—高精度计算—实验验证”的研发流程。

4.2 原位表征数据的多模态融合

机理解析的另一核心环节,是将原位或操作态表征结果转化为可用于模型分析的结构化信息。传统研究中,表征数据通常在实验完成后用于解释已观察到的性能;在AI驱动研究中,多模态表征信

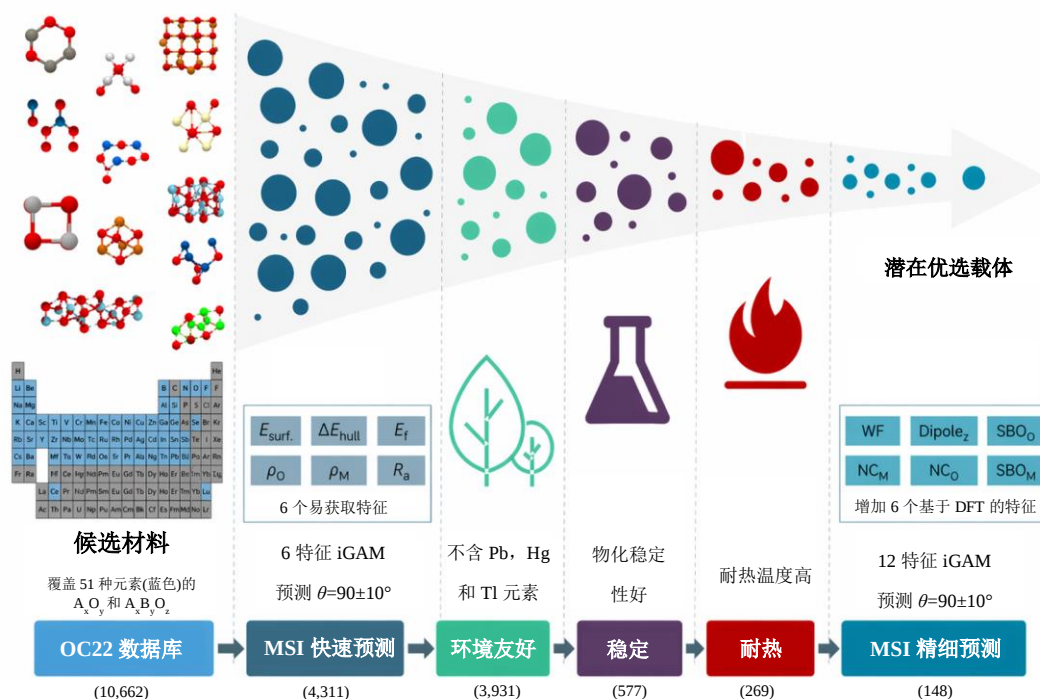
息还需与催化剂组成、反应条件和性能标签对应。虽然直接面向沼气重整的AI表征数据处理尚处起步阶段,但已有多项实验积累了高价值机理证据。 Ni/CeO_2 /水滑石衍生体系揭示了 Ce^{3+}/Ce^{4+} 循环在 CO_2/H_2O 协同活化与碳清除中的关键作用^[16];Pt-Ni双金属体系为SMSI对活性位结构及长期稳定性的调控提供了实验支撑^[17]。 $FeNi/Al-Ce-O$ 、 $Ni/Nd_2Zr_2O_7$ 和 $Ni-ZrO_2$ 等体系从不同侧面阐明了氧空位与表面碱性的协同效应^[32,57,62]; Dy_2O_3 负载Ni体系则从 $Ni^{\delta+}$ -载体电子协同角度解释了稳定性来源^[50]。这些原位表征数据与机理解释可为后续AI建模提供数据基础。

上述表征证据只有与结构化性能数据、计算描述符和实验上下文建立对应关系,才能转化为多模态训练数据。DRIFTS可揭示表面中间体物种的演化过程,XRD可提供晶相和粒径信息,XPS可反映表面元素价态和化学环境变化,TEM可直接观测纳米颗粒形貌和分散状态,TPR/TPO可表征材料的还原与氧化行为。这些结果不应仅作为附加论证,而应成为活性位识别和失活诊断的重要数据层。当前制约该方向发展的因素并非表征手段不足,而是标签不统一、数据格式缺乏标准以及不同实验口径难以衔接^[11,61]。

多模态数据融合并非简单地将光谱、电镜和性能数据拼接到同一数据表中。可用于建模的多模态数据应满足三个一致性条件:对象一致(同一催化剂样品)、测试时点一致(同一反应阶段)和状态定义一致(同一失活状态)。这三个条件需要在实验设计阶段预先规划,而不是在分析阶段再尝试整合异构数据。

4.3 可解释模型与证据链闭合

对沼气重整催化剂的筛选与优化而言,仅知道“某催化剂更优”并非研究的最终目标,关键在于该优势究竟源于 CH_4 解离与 CO_2/H_2O 活化增强、活性位分散性改善、消碳路径变化,还是仅来自更有利的测试条件。可解释机器学习的意义在于将候选排序与结构、机理判断连接起来。常用方法包括基于树模型的特征重要性排序、SHAP分析和部分依赖图等。Jiang等^[63]关于抗烧结载体的研究表明,可解释模型能将“筛出候选”推进到“为什么选择它”的层面(图5);能源催化领域的研究亦指出,更有价值的方向是引入物理约束或灰箱方法,将已知物理化学规律嵌入模型结构^[67]。

图5 通过可解释机器学习识别抗烧结载体示意图^[63]Fig. 5 Schematic of sinter-resistant support identification via interpretable machine learning^[63]

对沼气重整催化剂而言, AI与机理融合的评价标准不是模型能否输出解释图, 而是其解释能否形成“计算—表征—实验”闭合证据链: 模型给出的关键特征归因是否能够通过DFT计算得到支持、通过原位表征得到证实、通过设计实验得到验证。沼气重整催化剂设计本身就是一组可由实验和理论共同检验的科学问题: 何种位点承担 CH_4 解离与 CO_2/H_2O 活化? 积碳与活性氧之间如何建立动态平衡? 高温波动气氛下金属颗粒为何仍能维持分散? 这些问题均有明确的实验验证路径, 非常适合作为可解释AI模型的验证目标。

5 挑战与展望

5.1 数据质量与可信建模

模型可用并不意味着模型可信。相关领域关于结果不确定性的研究表明, 即使预测误差指标较低, 模型仍可能在外推区域给出高置信度的错误判断^[82]。在小样本、高异质和强条件敏感的数据环境中, 模型的价值不只在预测均值, 更在于说明哪些候选值得优先实验、哪些结论风险较高以及哪些区域已经超出训练边界。纳米颗粒稳定性的可解释性模型研究进一步揭示, 若不能将结构稳定性来源与表示学习过程同时显式化, 模型即使获得较低

误差亦难以支撑候选风险判断^[83]。

沼气来源波动、杂质扰动、长期稳定性和放大条件差异, 使实验室尺度的最佳催化剂未必具备工程可迁移性。未来可信建模应同时考虑三类不确定性: 样本稀缺导致的认知不确定性, 原料组成和运行条件波动导致的情景不确定性, 以及测量、抽取和表征误差导致的数据不确定性, 相应地, 模型输出应尽可能同时给出预测值、置信区间、适用范围和下一轮实验建议。失败样本和负结果也应纳入数据库, 以约束搜索空间并减少只反馈正结果造成的预测偏差。

5.2 构建实验反馈与模型更新流程

要使模型预测真正服务于催化剂研发, 关键在于模型预测结果能否转化为可执行的实验方案, 实验结果又能否及时反馈并用于模型更新。材料数字化生态和自动化实验平台的研究表明, 数据库、模型、自动化实验与智能体可在材料研发中形成协同关系^[14,84-85]。对沼气重整催化剂而言, 模型不应直接给出最终答案, 而应服务于“文献整合—候选生成—风险过滤—实验验证—失活表征—结果反馈—模型更新”的迭代过程^[12,15]。多催化协同作用发现与多智能体单原子催化剂设计的最新探索表明, 大模型与智能体更适合承担假设生成和约束整合, 而

非越过实验直接输出结论^[71,86]。数据、模型与实验之间的关系见图6。

上述流程目前仍存在明显断点:文献数据转化为可训练数据仍需大量人工清洗;候选筛选与实验设计之间缺乏统一的优先级决策规则;长期稳定性测试成本高、周期长,实验数据难以及时用于模型更新;工艺评价与材料评价常被分离处理。因此,现有研究大多仍停留在单点优化阶段。相关领域的新材料研发智能化研究也表明,可落地的平台需要同时考虑数据治理、模型审查、实验接口和工程评价^[87-89]。

为了提高人工智能辅助方法的可用性,应优先建立可执行的最小研究流程:结构化文献信息抽取、候选筛选规则、标准化验证实验、多尺度表征以及包含正负结果的数据反馈机制。失败结果同样

重要。对高维设计空间而言,失败样本并非应被丢弃的噪声,而是约束候选空间和校正模型置信度的关键信息。若模型只接收正结果反馈,容易高估特定材料的潜力。AI和自动化平台提升的是证据组织与迭代效率,研究者对体系的专业判断仍然决定问题是否被正确提出、数据是否被合理解释。

5.3 未来研究方向

该领域后续应沿五个方向重点推进:(1)面向真实沼气和模拟沼气重整场景建设结构化数据库,统一组分、制备、工况、表征、稳定性和失效字段,并标明真实沼气数据、相邻重整体系数据和方法类数据的来源差异;(2)发展适用于小样本、多目标和强工况敏感体系的物理约束与不确定性感知模型,使模型输出服务于实验排序和风险识别;(3)推动DFT、MLIP、微观动力学、原位表征与文献抽取协

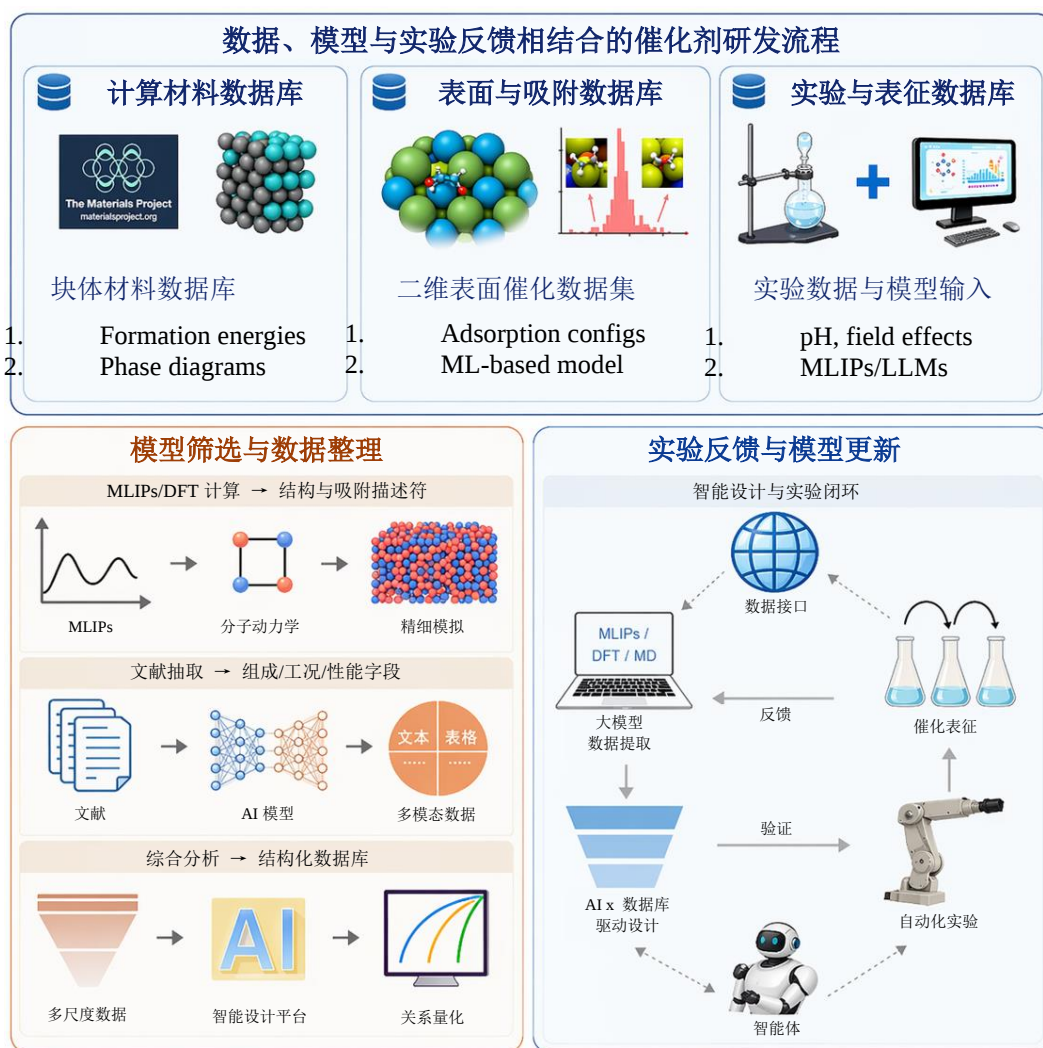


图6 数据、模型与实验反馈相结合的催化剂研发流程示意图^[70]

Fig. 6 Schematic workflow for catalyst research and development integrating data, models, and experimental feedback^[70]

同,构建从电子结构到宏观性能的多尺度证据链;(4)将原料组成波动、H₂S/硅氧烷中毒、水分扰动、积碳、烧结、床层压降升高、传热不均、局部热点、载体机械强度下降和再生后活性衰减等因素,分别转化为失效标签、约束项或惩罚项;(5)审慎吸收多智能体与自主科研平台的新进展,使其服务于数据整理、候选生成和实验反馈,而不是承担超出当前数据基础的结论输出。

上述方向建议按照“基础先行、能力递进”的原则分阶段推进。首先需要完成数据来源标注、字段统一和稳定性口径收敛,因为这些工作决定了后续模型训练与跨实验室比较是否成立;随后围绕小样本条件建立可信预测与实验排序框架;在具备稳定数据基础后,引入多模态机理学习和更复杂的智能体协同。当前关键瓶颈与优先改进方向归纳于表8。

AI在沼气重整催化剂研究中的价值具有明确的适用边界。它能提升数据组织效率、压缩搜索空间、增强多源证据整合能力,有助于推动研究从经验试错转向理性决策;但它不能替代高质量实验,不能替代长周期稳定性考核,亦不能替代基于反应机理与工程约束的专业判断。在当前数据基础尚不完备的阶段,过度偏重模型输出而忽略实验复核,可能造成系统性偏差。AI的引入改变了研究的效率与组织方式,但并未改变催化科学对严格实验验证与逻辑自洽性的根本要求。

6 结论

沼气重整催化剂研究不应只追求较高的初始转化率,还应在重整路线差异、原料组成波动、杂质扰动和长期失活等约束下,实现可比较、可验证和可迭代的筛选与优化。现有研究已在Ni基催化体系、贵金属和多金属改性、失活调控及数据治理等方面形成较扎实的基础,但直接面向沼气重整的AI筛选与优化研究仍处于起步阶段。一般DRM、SRM、BRM及其他能源催化体系可提供方法参考和机理类比,但相关结论仍需在真实沼气或模拟沼气条件下验证。

AI主要可用于文献数据提取、结构化数据库构建、候选配方排序、反应条件优化、多目标权衡和多源证据整合;其作用是提高证据组织和实验决策效率,而不能脱离实验独立完成催化剂设计。未来应同步推进数据治理、可信建模、外部验证和工程适配,并将模型预测与DFT/MLIP计算、原位表征、长期稳定性实验及系统评价相结合,逐步形成数据、模型、机理与实验相互校正的研究流程。

表8 沼气重整催化剂人工智能辅助研究的关键瓶颈与优先改进方向

Table 8 Key bottlenecks and priority improvements for artificial-intelligence-assisted research on biogas reforming catalysts

瓶颈类别	具体表现	直接影响	优先改进方向
数据基础	关键字段缺失,报告口径不一,真实沼气杂质和负结果未系统记录	模型输入质量低,跨实验室数据不可比	建立标准化报告规范,构建分层基准数据集,并记录数据来源和质量评分
数据适用边界	真实/模拟沼气数据、相邻重整体系数据和方法类文献混用	容易将相邻体系结论过度外推至沼气重整体系	在正文和表格中标明数据来源,区分直接证据、机理类比和方法迁移
模型可信度	以内部验证为主,缺乏适用范围判断、不确定性量化和外部验证	预测结果难以可靠支撑实验决策	引入不确定性量化、外部测试、跨实验室验证和前瞻实验验证
实验反馈	候选推荐与实验验证之间缺乏系统对接,失败结果未回流	模型无法依据新数据修正,易产生预测偏差	构建最小反馈单元,标准化结果回流与模型更新流程
稳定性评价	测试时长偏短,失活判据与工况条件绑定不充分	稳定性标签跨研究不可比,可能误导材料排序	统一稳定性测试规程,配套反应后表征和工况记录
工程适配	材料层评价与过程层评价分离,原料波动、杂质、中毒、压降和传热问题纳入不足	候选方案难以匹配真实装置条件与下游工艺需求	将能量、物质、经济、环境、安全和运行稳定性约束前置纳入优化目标

参考文献

- [1] Luo T, Shen B, Mei Z L, et al. Unlocking the potential of biogas systems for energy production and climate solutions in rural communities[J]. *Nature Communications*, 2024, **15**(1): 5900.
- [2] Hu W, Wu J D, Huang Z A, et al. Catalyst development for biogas dry reforming: a review of recent progress[J]. *Catalysts*, 2024, **14** (8): 494–510.
- [3] Nogales-Delgado S, Álvarez-Medina C M, Montes V, et al. A review on the use of catalysis for biogas steam reforming[J]. *Catalysts*, 2023, **13**(12): 1482.
- [4] Jung S, Lee J, Moon D H, et al. Upgrading biogas into syngas through dry reforming[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, **143**: 110949.
- [5] 李学琴, 王庚益, 魏潇, 等. 催化甲烷-二氧化碳干重整技术现状 & 催化剂研究进展[J]. *低碳化学与化工*, 2025, **50**(5): 69–76.
- [6] Li X Q, Wang G Y, Wei X, et al. Current status of dry reforming of methane and carbon dioxide technology and research progress of catalysts[J]. *Low-Carbon Chemistry and Chemical Engineering*, 2025, **50**(5): 69–76.
- [7] Chu F H, Jiang Y T, Li Z H, et al. Sustainable biogas-to-syngas catalytic dry reforming of methane (DRM) using a novel fleece reactor[J]. *Sustainability*, 2026, **18**(6): 3151.
- [8] Selejan-Ciubancan A D, Sandu V C, Cormos A M, et al. Energy, economic, and environmental (3E) analysis of green hydrogen production based on biogas steam reforming[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2026, **65**(10): 5547–5562.
- [9] Osazuwa O U, Vo D N, Ng K H. Hydrogen energy from biogas (CO_2 and CH_4) via dry reforming of methane: a review on confined Ni-catalysts[J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2025, **198**: 107045.
- [10] Kumar R, Kumar A. Steam reforming of methane and biogas: Thermodynamic and kinetic review for hydrogen production[J]. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, 2026, **45**(2): e70345.
- [11] Liu J, Sun H D, Hu S H, et al. Hydrogen production from the steam reforming of biogas over Ni-based catalyst: The role of promoters and supports[J]. *Energy*, 2024, **311**: 133480.
- [12] Salim I, Berrouk A S. Toward efficient reporting for catalytic methane reforming data: a framework and review for standardized scientific data reporting[J]. *npj Computational Materials*, 2026, **12** (1): 85–99.
- [13] Chen H H, Liu H X, Tew Y, et al. Distilling knowledge from catalysis literature with long-context large language model agents [J]. *ACS Catalysis*, 2025, **15**(21): 18244–18254.
- [14] Cheng M Y, Fu C L, Okabe R, et al. Artificial intelligence-driven approaches for materials design and discovery[J]. *Nature Materials*, 2026, **25**(2): 174–190.
- [15] Zhang D, Jia X, Wang Y H, et al. Digital materials ecosystem: from databases to AI agents for autonomous discovery[J]. *Chemical Science*, 2026, **17**(12): 5782–5804.
- [16] Ding K Y, Yu J, Huang J J, et al. SciToolAgent: a knowledge-graph-driven scientific agent for multitool integration[J]. *Nature Computational Science*, 2025, **5**(10): 962–972.
- [17] Tan T, Chen Y S, Wang Y Y, et al. Insight into the effects of the $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ activation and Ce redox cycle over Ni/CeO₂/hydrotalcite catalyst surface on biogas bi-reforming for methanol friendly syngas[J]. *Energy*, 2024, **313**: 133954.
- [18] Wang Y Y, Han B, Zeng C, et al. Pt-Ni bimetallic alloy catalyst with strong metal support interactions for Bi-Reforming to produce syngas[J]. *Separation and Purification Technology*, 2025, **371**: 133310.
- [19] Tang J L, Zhang L L, Chen K J. RuCu/CeZrO₂ modified defective carbon from biogas residue: a high-performance and coking-resistant catalyst for bi-reforming towards methanol-syngas production[J]. *Separation and Purification Technology*, 2026, **394**: 137573.
- [20] Fu J Y, Si Y R, Huang W, et al. Enhancing syngas production from biogas: Combined steam and CO₂ reforming over mechanochemically synthesized Ru/CeO₂-Al₂O₃ catalysts[J]. *Journal of the Energy Institute*, 2025, **123**: 102261.
- [21] Riofrio A, Bañares M A, Zhang Z L, et al. A perspective on transforming fats, oil, and grease (FOG) into hydrogen: insights on steam reforming catalysts and the case study of Hong Kong using techno-economic analysis and life cycle assessment[J]. *Green Chemical Engineering*, 2025, **6**(4): 473–493.
- [22] Manfro R L, Souza M M V M. Overview of Ni-based catalysts for hydrogen production from biogas reforming[J]. *Catalysts*, 2023, **13** (9): 1296.
- [23] Cao B W, Zhang J L, Wang W L. Rational design of Ni-based catalysts for methane dry reforming: Recent advances and future perspectives[J]. *FlexMat*, 2026: 70047.
- [24] Xu Y M, Qiao J S, Sun W, et al. Enhancement of CO₂ activation and coke-resistant ability on Ni/CeO₂ catalyst with La doping for dry reforming of methane[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, **88**: 1451–1462.
- [25] Li S F, Ding A Z, Zhang W C, et al. Three-dimensionally ordered macroporous La₂O₃-supported Ni catalyst for methane dry reforming[J]. *Catalysts*, 2025, **15**(10): 992–1008.
- [26] Sattari O, Nematollahi B, Rezaei M, et al. Effect of MgO on the catalytic activity and stability of nickel-based catalyst in methane dry reforming reaction[J]. *Scientific Reports*, 2025, **15**(1): 39649.
- [27] Zheng T T, Zhou Y Q, Cui H J, et al. Comparative study on Ni/MgO-Al₂O₃ catalysts for dry and combined steam - CO₂ reforming of methane[J]. *Catalysts*, 2025, **15**(7): 659–676.
- [28] Duan S S, Lu Z H, Lv Y K. Dry reforming of methane on Ni/SBA-15 catalysts prepared by citrate-assisted impregnation: effect of various pH values of the preparation solution on structure and catalytic properties[J]. *Catalysts*, 2026, **16**(2): 131–147.
- [29] Nunnari C, Fotia A, Malara A, et al. Micro- and mesoporous silica-based materials as support catalysts in reforming reactions [J]. *Catalysts*, 2026, **16**(3): 218–239.
- [30] Bele V, Hassini H, Rizzi A, et al. From biomass residues to syngas: Intensified biogas upgrading through nickel hydroxyapatite-catalysed dry reforming[J]. *Biomass and Bioenergy*, 2026, **210**: 108989.
- [31] Olp R, Hohn K L, Almquist C B. A novel polymer-derived Ni/SiOC catalyst for the dry reforming of methane[J]. *Catalysts*, 2025, **15**(7): 645–662.
- [32] Mbuya C O L, Pawar K, Jafari M, et al. Tuning catalyst performance in methane dry reforming via microwave irradiation of Nickel-Silicon carbide systems[J]. *Journal of CO₂ Utilization*, 2025, **102**: 103270.

- [32] Huang W W, Gan Z X, Mei M L, et al. Synergy of oxygen vacancies and NiO species to promote the coke-resistance of Ni/Nd₂Zr₂O₇ catalyst for dry reforming of methane[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, **523**: 168481.
- [33] Ratana T, Tungkamani S, Srisuwan S, et al. Synergistic role of ZrO₂ promoter and Ni - NiO - ZrO₂ networks in improving Ni catalysts for dry methane reforming at low temperature[J]. Catalysts, 2026, **16**(2): 191-207.
- [34] Shen D, Wei J H, Li T S, et al. Synergistic support functionalization for highly stable Ni catalysts derived from coal gasification slag in dry reforming of methane[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2026, **227**: 154622.
- [35] Li Y, Yu M, Qi G D, et al. Designing a mordenite catalyst with enhanced acidity for dimethyl ether carbonylation by engineering open Sn sites[J]. Engineering, 2024, **35**: 104-114.
- [36] Tian F H, Zhao Z W, Yu X G, et al. Enhanced performance of Ru catalysts on high-entropy rare earth oxide supports for dry reforming of methane[J]. Nano Research, 2026: 94908643.
- [37] Kamran M, Yang X L, Sajjad M, et al. Analysis of performance-property relationship in cobalt-based catalysts for methane dry reforming[J]. The Chemical Record, 2026, **26**(5): e202500348.
- [38] Liu J M, Zhang J X, Hua Y N, et al. CeO₂ nanorod-supported Ni - Co catalysts for stable and efficient dry reforming of methane[J]. ChemNanoMat, 2026, **12**(2): e202500649.
- [39] Hasan I U, Aqil A, Ahmed S, et al. Reducibility and kinetic modeling of praseodymium-promoted Ni/Al₂O₃ catalysts for dry reforming of methane[J]. Molecular Catalysis, 2026, **595**: 115880.
- [40] Bentalib A S, Alwadai N, Ibrahim A A, et al. The impact of Rh, La, Sm, and Au on the development of Ni/Al₂O₃ catalysts in the dry reforming of methane to produce synthesis gas[J]. Research on Chemical Intermediates, 2026, **52**(5): 3061-3085.
- [41] Steffens C M, Perez-Lopez O W. Dry reforming of biogas over Li - Ni - Al catalysts: influence of Li incorporation method[J]. Greenhouse Gases: Science and Technology, 2026: e70016.
- [42] Osazuwa O U, Ng K H, Vo D N, et al. Catalyst innovations and mechanism in photocatalytic dry reforming of methane: Recent advances and perspectives[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2026, **209**: 108550.
- [43] Pan T T, Ma J L, Chen Z X, et al. Perspective on MOFs-derived catalysts for photothermal dry reforming of methane[J]. Chemical Synthesis, 2026, **6**(1): 1-10.
- [44] Muscetta M, Jarusheh H S, Williams G, et al. Toward the efficient utilization of solar energy for hydrogen production through photocatalytic reforming: a literature and patent review[J]. Chemical Engineering Journal, 2026, **532**: 174189.
- [45] Chung H Y, Wong R J, Wu H, et al. Scalable and integrated photocatalytic reactor systems for solar-to-fuel production: photoredox and photoreforming processes[J]. Advanced Energy Materials, 2025, **15**(28): 2404956.
- [46] Nguyen D M, Tom T, Tran M N, et al. Turning a solar cell into a catalyst: (Ag, Cu)(In, Ga)Se₂ p - n junction enabling ambient dry reforming of methane[J]. Applied Catalysis B: Environment and Energy, 2026, **384**: 126132.
- [47] Ma R Y, Yang T, Yang Y H, et al. A brief overview on the catalysts for dry reforming of methane *via* photo and photothermal catalysis[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2026, **223**: 154304.
- [48] Kuang S Y. Recent advances in microwave-assisted dry reforming of methane: catalyst, performance, and fundamentals[J]. Frontiers in Chemistry, 2025, **13**: 1681282.
- [49] Yadav P K, Jabotra G, Sharma S. Effect of partial noble metal (M = Pd, Rh, Ru, Pt) substitution in La_{1-x}Sr_xCo_{1-y}MyO₃ perovskite-derived catalysts for dry reforming of methane[J]. Hydrogen, 2025, **6**(3): 49-64.
- [50] Zhao W X, Qin J J, Liu W P, et al. Dry reforming of methane over dysprosium oxide - supported Ni catalysts: Enhanced stability and coke suppression *via* Ni²⁺ - support synergy[J]. Fuel, 2026, **423**: 139238.
- [51] Wei J H, Liu Y N, et al. Rational design of Y-promoted Co/Al₂O₃ Catalysts with bimodal porosity for dry reforming of methane: enhanced reducibility, surface basicity, and coke resistance[J]. Energy & Fuels, 2026, **40**(13): 7097-7108.
- [52] 胡明亮, 周微, 李滨, 等. 协同效应催化甲烷二氧化碳重整研究进展[J]. 无机盐工业, 2024, **56**(1): 23-32.
- [52] Hu M L, Zhou W, Li B, et al. Research progress of synergistic effect catalytic reforming of methane and carbon dioxide[J]. Inorganic Chemicals Industry, 2024, **56**(1): 23-32.
- [53] Liu J J, Yi Q J, Gao J J, et al. High-temperature calcination improves catalytic activity and stability of Ce-doped Ni/MgO nanocatalysts for dry reforming of methane[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2026, **65**(12): 6511-6523.
- [54] Manabayeva A, Mäki-Arvela P, Vajgllová Z, et al. Dry reforming of methane over rare-earth metal oxide Ni - M - Al (M = Ce, La) catalysts[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2023, **62**(48): 20588-20607.
- [55] Sorto J E P, Mendonça I F, Schultz E L, et al. Hydrogen-rich syngas from model biogas steam reforming over a Ni - Pr/hydrotalcite-derived catalyst: an RSM-central composite rotational design[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, **118**: 179-194.
- [56] Jiang L, Tian D, Deng G X, et al. Robust Ni-Fe single atom alloy catalyst for oxygen-involved dry reforming of methane under mild conditions[J]. Science China Chemistry, 2026: 1-11.
- [57] Zhang T, Liu Z C, Ye Y C, et al. Dry reforming of ethane over FeNi/Al - Ce - O catalysts: composition-induced strong metal - support interactions[J]. Engineering, 2022, **18**: 173-185.
- [58] Zhang X S, Hua W D, Lin Y, et al. Unraveling Ni particle size effects in ethanol steam reforming over Ni/CeO₂ catalysts[J]. Carbon and Hydrogen, 2025, **27**(4): 473-482.
- [59] Eaton C W, Alt S R, Martinelli M, et al. Tuning methanol transformation pathways for sustainable steam reforming: Na-promotion effects on Ag/m-ZrO₂ catalysts[J]. Catalysts, 2026, **16**(4): 314-338.
- [60] 陶一, 张晨, 朱洪翔, 等. 基于催化重整分子级模型的物质流量分析方法[J]. 化工学报, 2025, **76**(12): 6465-6476.
- [60] Tao Y, Zhang C, Zhu H X, et al. Substance flow analysis method based on molecular-level model for catalytic reforming process[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(12): 6465-6476.
- [61] Zhang D, Jia X, Tran H B, et al. "DIVE" into hydrogen storage materials discovery with AI agents[J]. Chemical Science, 2026, **17**(6): 3031-3042.
- [62] Liu B R, Chai R Q, Wang X H, et al. Synergistic regulation of defect and basic sites in Ni - ZrO₂ catalysts for dry reforming of methane[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2026, **224**:

- 154439.
- [63] Jiang C G, Yan B, Goldsmith B R, et al. Predictive model for the discovery of sinter-resistant supports for metallic nanoparticle catalysts by interpretable machine learning[J]. *Nature Catalysis*, 2025, **8**(10): 1038–1050.
- [64] Chang X, Wu S C, Ma X, et al. Domain-specific fine-tuning of large language models and intelligent question-answering system for industrial catalysis[J]. *Smart Chemical Engineering*, 2026, **2** (1): 2–13.
- [65] Liu X Y, Peng H J. Toward next-generation heterogeneous catalysts: empowering surface reactivity prediction with machine learning[J]. *Engineering*, 2024, **39**: 25–44.
- [66] Jiang M X, Zhou J, An Y G, et al. Artificial intelligence for energy materials research: From classical machine learning to large models[J]. *ENGINEERING Energy*, 2026, **20**(1): 10535.
- [67] Hu Z B, Wang Z K, Peng Y Y, et al. Machine learning-guided design of energy-related catalysts from nanoparticles to single-atom sites[J]. *Communications Chemistry*, 2026, **9**: 128.
- [68] Jiang Y J, Yu Y M, Kong M, et al. Artificial intelligence for retrosynthesis prediction[J]. *Engineering*, 2023, **25**: 32–50.
- [69] 王雅丽, 付友思, 陈俊宏, 等. 酶工程: 从人工设计到人工智能[J]. *化工学报*, 2021, **72**(7): 3591–3600.
- Wang Y L, Fu Y S, Chen J H, et al. Enzyme engineering: from artificial design to artificial intelligence[J]. *CIESC Journal*, 2021, **72**(7): 3591–3600.
- [70] Zhang D, Chen Y Z, Liu C Y, et al. Accelerating catalyst materials discovery with large artificial intelligence models[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2026, **65**(16): e26150.
- [71] Sak M H, Liu R Y, Kwan E E, et al. Accelerating the discovery of multicatalytic cooperativity[J]. *Nature*, 2025, **648**(8093): 333–340.
- [72] Du P F, Ait A, Fakir E, et al. Machine learning-assisted development of high-performance ethanol synthesis catalysts via CO₂ hydrogenation[EB/OL]. 2026: ChemRxiv: 15001116. <https://chemrxiv.org/doi/abs/10.26434/chemrxiv.15001116/v1>.
- [73] 郭恭涵, 丁晖殿, 李强, 等. 间歇精馏操作过程的动态贝叶斯优化方法[J]. *化工学报*, 2025, **76**(2): 755–768.
- Guo G H, Ding H D, Li Q, et al. Dynamic Bayesian optimization method for batch distillation operation process[J]. *CIESC Journal*, 2025, **76**(2): 755–768.
- [74] Ayodele B V, Hossain S S, Ridzuan N D M, et al. Catalytic CO₂ utilization for ethanol reforming over yttrium-promoted Ni-Co/MCM-41 catalyst: optimizing hydrogen production using box-behken experimental design and response surface methodology[J]. *Catalysts*, 2026, **16**(1): 91–107.
- [75] Regonia P R, Pelicano C M. Data-guided photocatalysis: supervised machine learning in water splitting and CO₂ conversion[J]. *Advanced Intelligent Discovery*, 2026: e202500122.
- [76] Pan Z, Wei L J, Wang T Y, et al. Machine learning for functional materials: insights from compositional, electronic, and dynamic processes[J]. *AAPPS Bulletin*, 2026, **36**(1): 5.
- [77] Han B, Wang Y Y, Huang Z T, et al. Sol-gel synthesis of Pt-Co-CeO_x codierite catalyst for biogas reforming to methanol compatible syngas[J]. *Energy*, 2025, **329**: 136707.
- [78] Loveday O, Kaźmierczak K, López N. Challenges and opportunities of pretrained machine learning interatomic potentials in heterogeneous catalysis[J]. *ACS Catalysis*, 2026, **16** (5): 4113–4124.
- [79] Morandi S, Loveday O, Renningholtz T, et al. An end-to-end framework for reactivity in heterogeneous catalysis[J]. *Nature Chemical Engineering*, 2026, **3**(3): 169–180.
- [80] Choi J, Kang S, Yeo B C, et al. Interfacial cooperation-driven volcano shifts in ammonia decomposition revealed by reaction-aware machine learning simulations[EB/OL]. 2026: ChemRxiv: 15001084. <https://chemrxiv.org/doi/full/10.26434/chemrxiv.15001084/v1>.
- [81] Linton N, Singh P, Aidhy D S. Framework to completely bypass expensive DFT calculations *via* graph neural networks for vacancy formation energy predictions in FCC high entropy alloys[J]. *npj Computational Materials*, 2026, **12**: 175.
- [82] Garain B C, Pinheiro M, de Oliveira Bispo M, et al. Uncertainty calibration in molecular machine learning: comparing evidential and ensemble approaches[J]. *Chemistry – A European Journal*, 2026, **32**(15): e03299.
- [83] Hawthorne F, Seixas L, Almeida J M, et al. Interpretable machine learning of nanoparticle stability through topological layer embeddings[EB/OL]. 2026: arXiv: 2602.17528. <https://arxiv.org/abs/2602.17528>.
- [84] Wang Z L, Ma Z F, Song W X, et al. AP-lab: an AI-driven autonomous pilot-scale platform bridging materials discovery and industrial manufacturing[J]. *Advanced Science*, 2026, **13**(22): e74293.
- [85] Lu C, Lu C, Lange R T, et al. Towards end-to-end automation of AI research[J]. *Nature*, 2026, **651**(8107): 914–919.
- [86] Mok D H, Back S, Fung V, et al. Reasoning-driven design of single atom catalysts *via* a multi-agent large language model framework[EB/OL]. 2026: arXiv: 2602.21533. <https://arxiv.org/abs/2602.21533>.
- [87] 陈晓红, 刘晓亮, 袁依格, 等. 基于人工智能技术的新污染物治理策略与路径研究[J]. *中国工程科学*, 2025, **27**(3): 152–163.
- Chen X H, Liu X L, Yuan Y G, et al. Strategies and pathways for emerging pollutant governance based on artificial intelligence technology[J]. *Strategic Study of Chinese Academy of Engineering*, 2025, **27**(3): 152–163.
- [88] Xing L, Chen Z, Zhan G X, et al. Efficient CO₂ desorption catalysts: from material design to kinetics analysis and application evaluation[J]. *Engineering*, 2025, **49**: 251–259.
- [89] 宿彦京, 杨明理, 祝伟丽, 等. 新材料研发智能化技术发展研究[J]. *中国工程科学*, 2023, **25**(3): 161–169.
- Su Y J, Yang M L, Zhu W L, et al. Development of key technologies for intelligent research and development of new materials[J]. *Strategic Study of CAE*, 2023, **25**(3): 161–169.