机制增强多任务蒸馏用于生物质基活性炭的预测与可解释设计

Mechanism-enhanced multitask distillation for predictive, interpretable design of biomass-based activated carbons activated carbons

Peng ZHAO, Jiahui ZHOU, Guangyao LI, Hao YU, Dongxu JI, Takahiko MIYAZAKI, Kyaw THU



Cite this as: Peng ZHAO, Jiahui ZHOU, Guangyao LI, Hao YU, Dongxu JI, Takahiko MIYAZAKI, Kyaw THU, 2026. Mechanism-enhanced multitask distillation for predictive, interpretable design of biomass-based activated carbons. *Journal of Zhejiang University-SCIENCE A*, 27(8):852-870. https://doi.org/10.1631/jzus.A2500628

研究问题：异质活性炭合成数据中的多目标权衡

目标不是单纯提高某一个指标，而是在孔结构提升与质量收率之间获得可解释平衡

MATERIAL / PROCESS CONTEXT

不同生物质原料
不同活化剂：KOH / H_3PO_4 / $ZnCl_2$ / ...
不同路线：one-step / two-step

METHOD GAP

TARGETS

S_{BET}
比表面积 / surface area

V_T
总孔体积 / total pore volume

Yield
质量收率 / mass yield

现有问题

- 小样本 + 稀疏实验点，难以稳定泛化
- 单任务模型忽略 S_BET / V_T / Yield 的耦合
- 黑箱预测难以转化为工艺窗口建议

本文策略

- 用多任务 ResDNN 同时学习三个目标
- 用 PD-KD / TA-KD 缓解机制混合和数据稀疏
- 用 robust Pareto screening 提取可执行温度—剂量—时间窗口

关键科学问题：模型能否在保持预测精度的同时，给出符合活化机理的解释和可操作的工艺推荐?

方法框架： AC-ResKD 的多任务蒸馏结构

Teacher library + shared ResDNN student + prediction-level and teacher-aware knowledge distillation

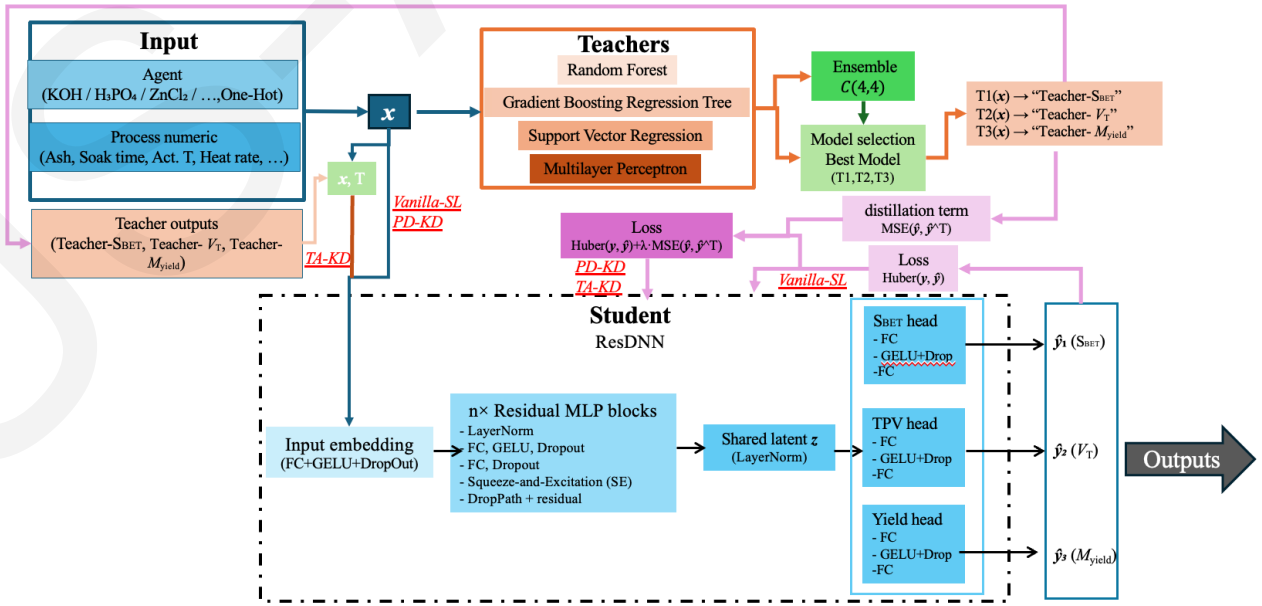
MODEL COMPONENTS

1 **Teacher library**
为不同目标选择合适的传统机器学习 teacher，提供目标相关的先验预测。

2 **Shared ResDNN**
共享 backbone + 多个输出头，同时预测 S_BET、V_T 和 Yield。

3 **PD-KD / TA-KD**
PD-KD 在损失层面引入 teacher soft targets；TA-KD 将 teacher predictions 作为辅助输入特征。

4 **Pareto screening**
在候选工艺空间中筛选稳定的 Pareto 区域，并用分位数窗口提取可执行参数范围。



Input: agent · temperature/time · impregnation · heating rate · precursor composition

实验设计：统一评价协议确保结果可比

Combined / one-step / two-step datasets; 20 repeated random 80/20 splits; metrics in original units

DATASET CONFIGURATIONS

Combined

混合 one-step 与 two-step 路线，机制异质性最高

One-step

碳化—活化耦合进行，浸渍条件影响更直接

Two-step

先热解再活化，预碳化阶段可塑造碳骨架

EVALUATION LOOP

Train/test split
80/20 × 20 repeats

→

Preprocessing
fit only on training set

→

Teacher selection
per-target, training set only

→

Student training
Vanilla-SL / PD-KD / TA-KD

→

Evaluation
R^2, RMSE, Pearson r

TARGETS AND CLAIM TYPE

- 所有性能指标在反归一化后的原始物理单位下计算，避免仅报告 scaled-space 结果。
- 最终定量结论基于 20 次重复随机划分的均值和 95% confidence intervals，而不是单次 split 的偶然结果。

主要结果：TA-KD 在多数任务上取得稳定优势

Separated routes show clearer monotonicity; mass yield is the most consistent beneficiary of distillation

TA-KD PERFORMANCE SUMMARY: R^2

Dataset	S_BET	V_T	Yield
Combined	0.768	0.739	0.816
One-step	0.806	0.787	0.825
Two-step	0.801	0.817	0.791

DISTILLATION EFFECT ON COMBINED DATASET

S_BET
+0.060 0.708 → 0.768

V_T
+0.081 0.658 → 0.739

Yield
+0.239 0.577 → 0.816

注：数值为 Table 1 中 TA-KD 的 R^2 均值；图中只强调摘要页最重要的性能趋势。

可解释性：特征重要性与活化机理保持一致

PFI / SHAP jointly identify teacher outputs, agent identity and thermal severity as dominant drivers

CONVERGENT INTERPRETATION

Teacher outputs	提供高信息先验，稳定小样本和异质标签下的学习。
Agent type	决定强碱、酸或盐活化路径，是孔结构—收率权衡的关键开关。
Thermal severity	activation temperature/time 调节刻蚀强度，是孔结构发育的主要连续变量。

ROUTE-SPECIFIC MECHANISTIC SIGNALS

One-step

浸渍条件对 V_T 更关键

Two-step

热解变量重要性上升

解释不是单独依赖一张 SHAP 图，而是与性能、calibration/parity behavior 和 Pareto 结果相互印证。

工艺优化：从预测模型到 route-/agent-specific operating windows

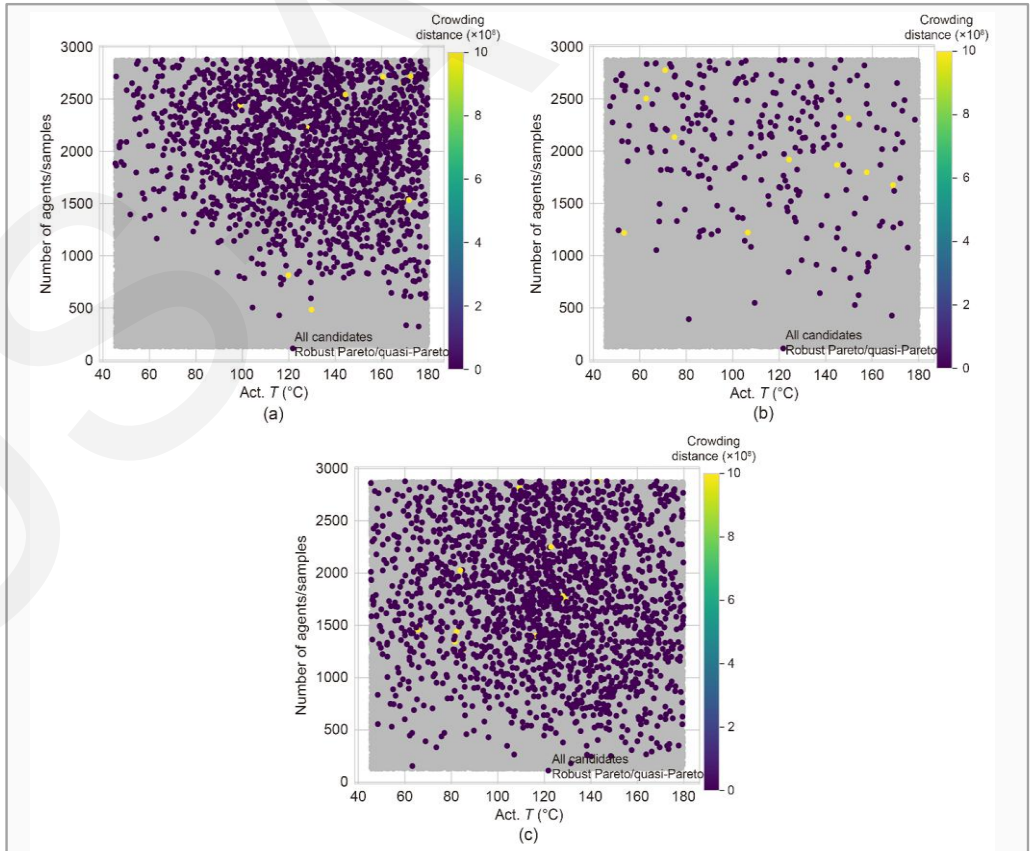
Robust Pareto screening + quantile-window extraction gives actionable temperature–dose–time envelopes

SUMMARY OF RECOMMENDED OPERATING SIGNATURES

Route	Agent	Process signature	Activation window
One-step	H_3PO_4	高剂量 + 充分浸渍	**638–682 °C**
One-step	KOH	低—中温高效刻蚀	**452–480 °C**
One-step	$ZnCl_2$	V_T-oriented envelope	**521–599 °C**
Two-step	$(NH_3)_2PO_4$	热解预成形 + 高温短活化	**786–835 °C**
Two-step	KOH	preform first, activate briefly	**633–715 °C**
Two-step	$ZnCl_2$	短时高温活化，偏 V_T 稳定	**799–832 °C**

SCIENTIFIC IMPLICATION

不存在单一通用最优条件；推荐窗口必须同时依赖 activation agent 和 processing route。Two-step 结果进一步说明 pyrolysis 是调节后续活化需求的上游杠杆。



Robust Pareto screening for one-step and two-step activation

结论：AC-ResKD 为小样本活性炭设计提供预测—解释—优化闭环

A concise academic summary for journal website / WeChat promotion

TAKE-HOME POINTS

Prediction	TA-KD 在 combined 与 route-separated datasets 中整体表现稳健，尤其显著改善 Yield 预测。
Mechanism	模型解释与活化机理一致：agent、temperature/time、impregnation 与 pyrolysis 共同控制孔结构—收率权衡。
Optimization	Robust Pareto screening 将模型输出转化为 route-/agent-specific 温度—剂量—时间窗口。

RELATED WORKS FOR PROMOTION

Zhao et al. (2025) TSEP: GIANet for zeolite adsorption | Yu et al. (2024) Powder Technology: pinecone-derived AC | Chairunnisa et al. (2024) J Mater Sci: sustainable AC review | Li et al. (2025) Energy: pine-cone AC for CO_2 capture

一句话摘要：AC-ResKD 在异质、小样本活性炭合成数据中联合学习孔结构与收率，并将预测结果转化为可解释的工艺窗口。

JZUS-A