

超级电容器关键材料与器件专刊



人工智能赋能超级电容器中多孔碳材料设计:数据、模型与机制协同驱动的研究进展

王江^{1,2}, 易宗琳¹, 郭杰晨^{1,2}, 张圣斌^{1,2}, 白乃瑞^{1,2}, 范亚锋¹, 苏方远¹

(¹中国科学院山西煤炭化学研究所, 炭材料山西省重点实验室, 山西太原 030001; ²中国科学院大学, 北京 100049)

摘要: 超级电容器具有高功率密度、快速充放电、长循环寿命和良好安全性, 在电网调频、能量回收和脉冲功率输出等场景中展现出重要应用价值。多孔碳材料凭借资源丰富、导电性较好、结构可调和电化学稳定性高, 长期占据超级电容器电极材料研究的重要地位。然而, 多孔碳材料存在前驱体复杂多样、制备参数耦合强、孔结构与表面化学协同调控困难、构效关系难以定量描述等问题, 传统经验试错方式已难以满足高效设计需求。人工智能与材料信息学的发展为超级电容器研究提供了新的方法学支撑。本文围绕“数据-模型-机制-优化”研究思路, 系统综述了人工智能在超级电容器中的研究进展: 首先总结了孔结构、表面化学、缺陷和电解液溶剂化等关键因素对储能行为的影响; 其次梳理了数据收集、特征工程、模型选择、可解释人工智能及其在性能预测中的应用; 进一步归纳了人工智能在碳源筛选、合成参数优化、逆向设计以及多目标器件优化中的代表性成果; 在此基础上, 讨论了人工智能与机器学习势函数、第一性原理计算、分子动力学等多尺度模拟的融合进展。最后, 针对当前领域中数据异构、评价标准不统一、模型泛化能力不足、解释性与机制验证脱节等问题, 提出了构建最小信息集、建立分层评价基准、强化人工智能-模拟-表征闭环以及推动自动化实验平台发展的建议。本文旨在为人工智能驱动的多孔碳材料从相关性拟合走向机制牵引设计提供参考。

关键词: 超级电容器; 多孔碳; 人工智能; 机器学习; 工艺参数优化; 多尺度模拟

doi: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2026.0300

中图分类号: TM 53

文献标志码: A

文章编号: 2095-4239 (2026) 05-1925-22

Artificial intelligence-enabled design of porous carbon materials for supercapacitors: Recent advances driven by data, models, and mechanisms

WANG Jiang^{1,2}, YI Zonglin¹, GUO Jiechen^{1,2}, ZHANG Shengbin^{1,2}, BAI Nairui^{1,2}, FAN Yafeng¹, SU Fangyuan¹

(¹Shanxi Key Laboratory of Carbon Materials, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan 030001, Shanxi, China; ²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Supercapacitors are an essential class of energy storage devices due to their high power density, fast charge-discharge cycles, long cycle life, and excellent safety performance.

收稿日期: 2026-04-08; 修改稿日期: 2026-04-23。

基金项目: 山西省优秀博士生来晋工作人才项目 (SYXBS202529), 山西省基础研究青年项目 (202503021212407), 炭材料山西省重点实验室自主研发课题 (SCJC-XCL-202503)。

第一作者: 王江 (1996—), 男, 硕士研究生, 研究方向为基于大语言模型的储能碳材料文本数据挖掘, E-mail: wangjiang24@mails.ucas.ac.cn; 通信作者: 易宗琳, 助理研究员, 研究方向为电化学储能器件技术开发, E-mail: yizonglin@sxicc.ac.cn; 苏方远, 研究员, 研究方向为电化学储能器件技术开发, E-mail: sufangyuan@sxicc.ac.cn。

引用本文: 王江, 易宗琳, 郭杰晨, 等. 人工智能赋能超级电容器中多孔碳材料设计: 数据、模型与机制协同驱动的研究进展[J]. 储能科学与技术, 2026, 15(5): 1925-1946.

Citation: WANG Jiang, YI Zonglin, GUO Jiechen, et al. Artificial intelligence-enabled design of porous carbon materials for supercapacitors: Recent advances driven by data, models, and mechanisms[J]. Energy Storage Science and Technology, 2026, 15(5): 1925-1946.

Porous carbon materials, owing to their abundant resources, good electrical conductivity, tunable structures, and high electrochemical stability, have long been considered as one of the most promising candidates for supercapacitor electrodes. However, the design of high-performance porous carbon materials for supercapacitors remains a significant challenge due to the complexity of precursor variability, the strong coupling of synthesis parameters, and difficulties in simultaneously optimizing pore structure and surface chemistry. Traditional trial-and-error approaches are no longer efficient enough to meet the demands of rapid and effective material design. This review provides a comprehensive overview of the recent progress in the design of porous carbon materials for supercapacitors, powered by artificial intelligence (AI). Specifically, the review follows a "data-model-mechanism-optimization" framework, which emphasizes the synergistic integration of data-driven methods, machine learning models, and mechanistic understanding. The first section discusses the key factors that influence the energy storage performance of supercapacitors, including pore structure, surface chemistry, defects, and electrolyte solvation. It highlights how the specific roles of nitrogen-, oxygen-, and sulfur-doped sites, as well as defects, can be controlled to enhance both electric double-layer capacitance (EDLC) and pseudocapacitance, depending on their chemical states and the interaction with the electrolyte environment. The review then moves on to summarize the data-driven AI workflows that are transforming the design of porous carbon materials. It explores data collection techniques, feature engineering approaches, model selection processes, and the role of interpretable AI. Key applications in performance prediction, precursor screening, and the optimization of synthesis parameters are discussed, including how AI models can predict the optimal pore structures, dopant levels, and synthesis routes for enhanced electrochemical performance. Additionally, the integration of AI with multiscale simulations—such as machine learning-based atomic potentials, density functional theory (DFT), and molecular dynamics (MD)—is examined, showing how these hybrid approaches provide deeper insights into the mechanisms governing ion transport and charge storage at the atomic scale. Furthermore, the review highlights representative achievements in AI-assisted inverse design and multi-objective optimization of supercapacitor devices. AI-driven methods have significantly advanced the understanding of multi-scale correlations between material properties, device parameters, and operational conditions. The ability to predict performance across different electrolytes and test conditions is a key milestone in advancing the generalizability of AI models. Finally, the review discusses the current challenges faced by the field, including data heterogeneity, inconsistent evaluation metrics, limited model generalization, and the disconnect between machine learning predictions and experimental validation. It proposes strategies to address these challenges, such as constructing minimal information sets, developing hierarchical evaluation benchmarks, strengthening the AI-simulation-characterization feedback loop, and promoting the development of automated experimental platforms. This review aims to guide future research in leveraging AI to transition the design of porous carbon materials for supercapacitors from empirical optimization to mechanism-driven discovery, ultimately leading to more efficient, reliable, and scalable energy storage solutions.

Keywords: supercapacitor; porous carbon; artificial intelligence; machine learning; synthesis optimization; multiscale simulation

储能技术的战略竞争焦点，正从单一追求高能量密度向功率响应速率、极端工况下的循环寿命以及系统运行安全性的综合优化方向演进。在高比例可再生能源并网、制动能量回收、电网毫秒级瞬态调频以及工业脉冲负载等严苛场景中，器件必须具备承受高频、大电流充放电冲击的能力。超级电容器凭借其快速的界面电荷吞吐机制、卓越的功率密度以及优异的循环寿命，在此类高频大功率储能器件中占据着不可替代的地位^[1-3]。然而，受限于较低的体积/质量能量密度以及跨工况使用时的性能衰减，其进一步工业化的应用仍面临严峻挑战^[4]。

在众多超级电容器电极材料中，多孔碳材料因具备来源广泛、本征电导率优异、电化学稳定窗口宽以及跨尺度孔隙结构高度可调等物理化学优势，处于基础研究与产业应用的重要地位^[3,5-7]。超级电容器能量密度的提升主要依赖两条路径：其一是构筑更高密度的有效储能位点以提升比电容量；其二是抑制副反应以拓宽器件的稳定工作电压窗口^[8]。然而，碳材料的合成与结构演化是一个典型的强耦合复杂系统。前驱体理化性质、活化工艺、孔径分布、表面杂原子掺杂构型与极片参数等变量，共同决定了最终的电化学性能。例如，极度追求高比表面积往往伴随着孔隙结构的脆弱化与压实密度的断崖式下降，进而导致离子传输阻力剧增^[9]。面对如此庞大的高维参数空间，传统的经验引导和实验试错方法不仅研发周期冗长、资源消耗巨大，且极难提炼出具备普适性可迁移的底层物理化学规律，迫切需要引入创新性的材料研发方法。

近年来，随着材料信息学与人工智能（artificial intelligence, AI）技术的蓬勃发展，基于碳材料的超级电容器的研究范式迎来了深刻变革^[9]。机器学习算法展现出卓越的高维数据处理能力，能够在跨文献的异构数据集中，精准提取并映射前驱体特征、工艺参数、微观结构、表面化学与宏观电化学性能之间的非线性网络关系，从而极大提升了极化电极材料的筛选与性能预测效率^[10]。更为关键的是，可解释人工智能（explainable artificial intelligence, XAI）的深度介入，正推动黑箱模型向透明化演进^[8,11]。例如，针对异质原子掺杂体系的研究表明，XAI能够精准识别N/S/O等元素共掺杂的协同热力学区间与动力学边界；而在富氧高孔隙碳材料的制备中，AI驱动的算法框架已成功实现

了从目标性能到结构约束、再到合成工艺的逆向全链条设计与实验回证^[12]。

鉴于此，为厘清人工智能赋能多孔碳超级电容器研究的方法学逻辑，本文立足于材料信息学前沿，以“数据-模型-机制-优化”的闭环迭代框架为主线开展综述，如图1所示。其中，数据层负责汇聚并治理文献、实验与模拟等多源异构信息，为模型训练提供标准化输入；模型层通过特征工程、机器学习与可解释分析实现性能预测和规律提取；机制层结合多尺度模拟与表征手段，对模型识别出的关键描述符和非线性关联进行物理化学回证；优化层则在此基础上进一步开展前驱体筛选、工艺参数寻优、逆向设计与实验验证，并将新获得的正负样本反馈至数据库，实现面向材料设计的持续迭代闭环。本文首先讨论超级电容器的储能机理及电化学性能的关键影响因素；其次梳理面向超级电容器的AI数据收集、特征选取与模型训练原则；随后总结AI驱动的前驱体筛选、工艺参数优化和材料设计研究进展；进而讨论AI与机器学习势函数、密度泛函理论、分子动力学等多尺度模拟的结合进展。最后，针对当前领域内数据异构、评价基准缺失、机制回证脱节等痛点，提出构建最小信息集标准、建立严苛分层评价基准、强化AI-模拟-表征闭环以及推动自动化实验室的发展建议。

1 超级电容器中多孔碳电荷储存机理与电化学性能影响因素

1.1 多孔碳电荷储存机理

多孔碳材料在超级电容器中的储能过程，本质上是电极/电解液界面处电荷积累、重排与释放的综合物理化学过程。对于以碳材料为主体的电极体系，其储能贡献通常可归纳为电化学双电层电容（electric double-layer capacitance, EDLC）与表面赝电容两类基本机制^[13]。

EDLC来源于电极表面对电解液离子的静电吸附。当外加电势作用于电极表面时，电解液中的溶剂化离子或部分脱溶剂化离子向界面迁移，并在电极表面附近形成由紧密层和扩散层组成的双电层结构，从而实现电荷分离与能量存储。由于该过程通常不涉及化学键断裂与生成，属于非法拉第过程，因此具有响应快、倍率性能好和循环稳定性高等特点^[9]。对于多孔碳电极而言，EDLC的实际贡献并

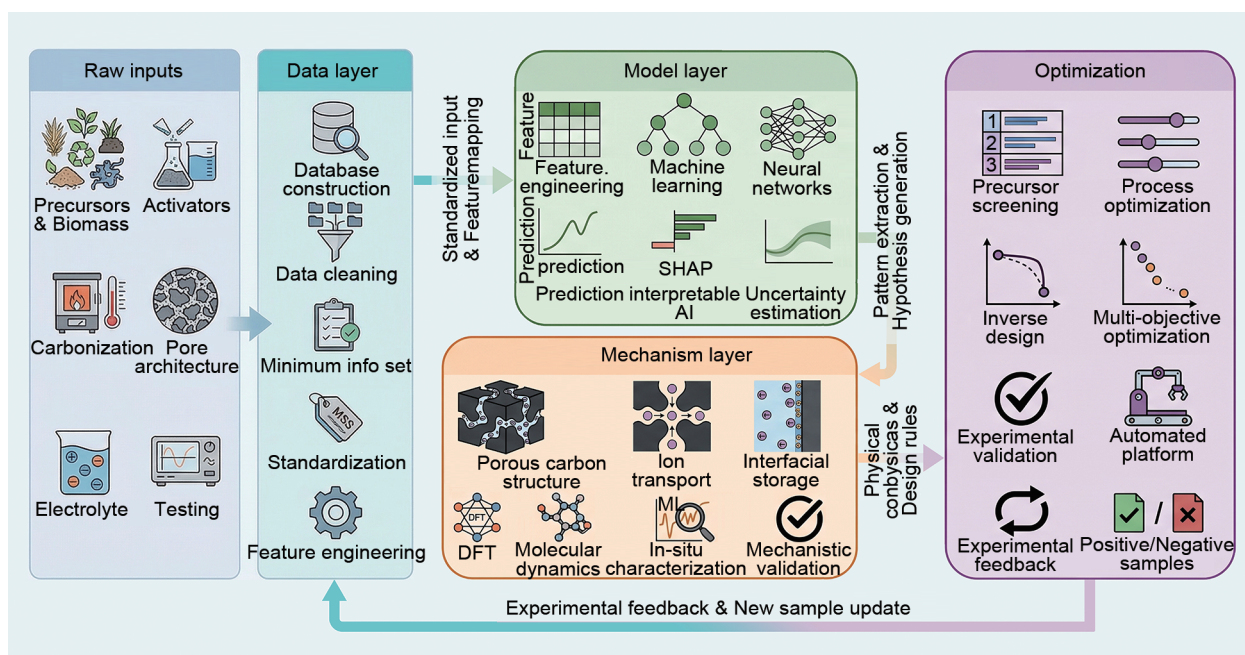


图1 人工智能赋能多孔碳超级电容器研究的“数据—模型—机制—优化”闭环框架

Fig. 1 Closed-loop framework of “data-model-mechanism-optimization” for AI-enabled research on porous carbon supercapacitors

不仅取决于理论比表面积，还取决于在给定的电解液体系、孔径限域条件和工作倍率下可被离子有效访问的表面位点数量^[14]。

与之相比，赝电容主要源于碳材料表面或近表面的含氧、含氮、含硫等官能团以及缺陷活性位点所参与的可逆法拉第反应。赝电容能够在一定程度上提高电极材料的比容量，但其有效贡献受到反应动力学、化学态稳定性以及电解液环境的共同制约^[15-16]。只有当相关表面反应在目标电压窗口内具有足够快的动力学响应、较高的可逆性及良好的界面匹配性时，法拉第过程才能转化为稳定可利用的赝电容贡献^[17]；反之，若反应伴随明显副反应或结构不可逆变化，则可能导致自放电加剧、极化增大和循环寿命下降^[9]。

因此，基于碳材料的超级电容器储能行为不宜被简单理解为EDLC主导、赝电容补充的线性叠加过程，而应从界面位点密度、离子可达性、脱溶剂化行为和反应动力学协同调控的角度进行整体认识^[9]。尤其在多孔碳体系中，孔径限域效应、局域表面化学与电解液溶剂化结构之间往往存在强耦合关系，这也是后续开展数据驱动建模与机制解析的理论基础^[18]。

1.2 多孔碳结构与性能关联

多孔碳的结构特征主要体现为碳骨架内部由不同尺度孔隙构成的三维拓扑网络。按照国际纯粹与应用化学联合会的分类^[19]，孔隙通常可分为微孔 (<2 nm)、介孔 (2~50 nm) 和大孔 (>50 nm)。在超级电容器体系中，不同尺度孔隙承担的功能并不相同：微孔主要提供电荷吸附所需的高密度界面位点，介孔有利于缩短离子扩散路径并促进离子在孔道中的传输与交换，大孔则可作为电解液储库和缓冲通道，改善厚电极或高倍率条件下的传质条件^[20]。

然而，结构参数与电化学性能之间的关联较为复杂，如图2所示。比表面积、总孔容、孔径分布等结构特征，必须与电解液溶剂化特性、测试电流密度及电压窗口等工况变量协同，才能准确拟合电容性能^[14]。仅有在实际工况（如高倍率测试与特定孔隙限域）下能够克服空间位阻与脱溶剂化能垒、允许离子有效进入的可达表面积，才对能量存储产生实质性贡献。此外，极高的孔隙率通常会导致压实密度的下降，进而而在高面载量条件下加剧离子传输极化，削弱器件的体积性能与倍率性能^[21]。因此，多孔碳结构设计的优化目标并非一味地追求理论比表面积的最大化，而是在特定的压实密度与电

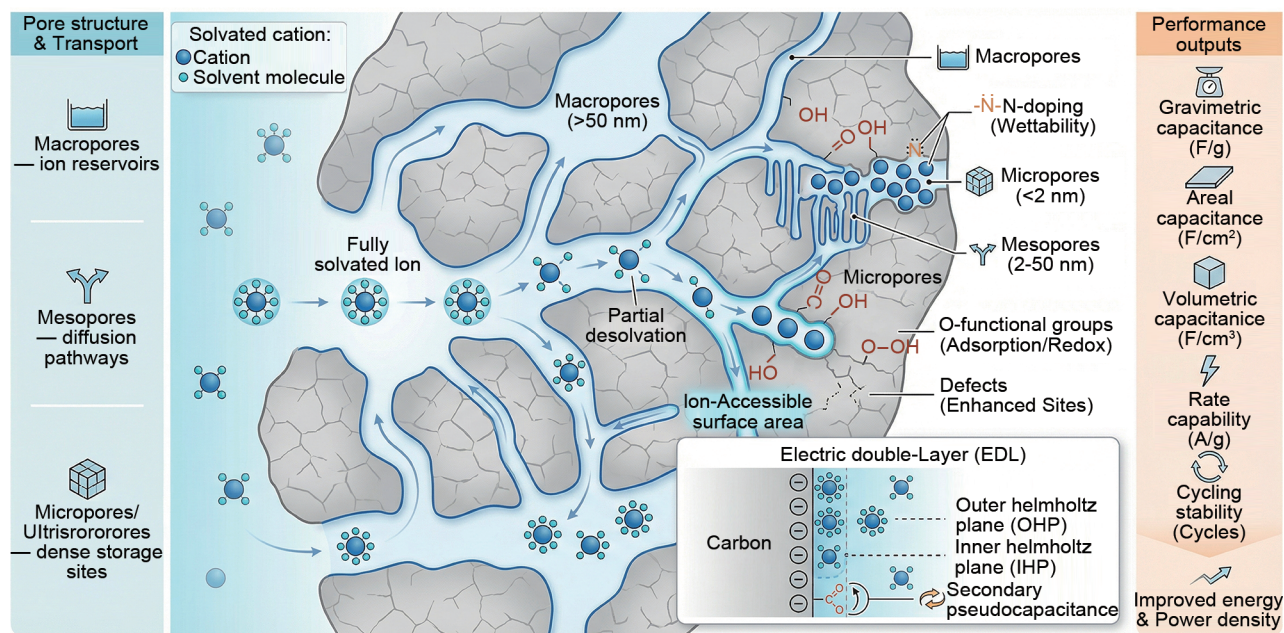


图2 孔-表面-溶剂化协同储能机制

Fig. 2 Synergistic pore-surface-solvation charge storage mechanism

解液体系约束下，构筑在目标工况下具有最高离子可达性的多级孔隙分布^[22]。

1.3 多孔碳的表面化学与缺陷

碳材料的表面化学主要指键合在碳骨架上的各类杂原子官能团，而缺陷则涵盖了非完美的拓扑结构、空位以及边缘位点等结构异质性区域。这些微观结构特征直接决定了材料局域电子结构的均匀性、界面离子亲和力以及法拉第反应活性^[9]。在电化学储能过程中，表面化学与缺陷工程表现出相互制约的双重效应。适度的缺陷与官能团修饰能够显著改善碳极板的浸润性，增加活性位点密度，并贡献一定的赝电容^[23]。然而，过度的缺陷化会严重破坏长程连续的 π 共轭结构，导致材料石墨化程度与本征电导率大幅下降，进而引发更严重的欧姆极化和更差的倍率性能^[24]。

研究表明，描述缺陷程度的拉曼光谱特征、比表面积、微孔体积与特定的杂原子含量之间均存在明确的最优物理窗口，一旦超出该区间，缺陷与传输劣化将抵消原始的电容增益^[25-26]。更为关键的是，决定界面活性的核心因素并非杂原子的总掺杂量，而是特定的化学态分布。研究发现^[27]，某些在二维平面模型中表现出高储能活性的掺杂位点，在三维微孔体系中可能因严重阻塞电解液离子传输通道而引发性能衰减；相反，如吡咯氮 (N_5) 等特定含氮

物种，则能够在三维限域孔隙中通过构建氢键网络有效维持离子的传输通道，从而提供正向的储能贡献^[28]。这表明，缺陷与表面化学的调控需置于“化学态分布-孔径限域效应-电解液溶剂化结构”的三元强耦合机制中进行系统性考量^[27]。

2 数据驱动的超级电容器的AI工作流简介

2.1 数据收集与治理

数据收集与治理是指从多源异构的实验记录、文献报道或计算平台中提取有效信息，并通过数据清洗、标准化和结构化映射，构建高保真度、机器可读的高质量数据库的系统性过程^[29]。由于超级电容器的电化学输出不仅取决于材料本征属性，还受到外部测试边界条件的强烈约束，因此数据的标准化程度直接决定了预测模型的理论上限。直接来源于高通量自动化设备或实验室内部的实验记录具备极高的数据一致性与统一的测试口径，但受限于物理实验的周期与成本，其样本规模往往难以覆盖庞大的前驱体与工艺参数；基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 或分子动力学 (molecular dynamics, MD) 的高通量计算平台，虽能快速生成高度标准化的微观结构与理论数据，但受限于理论模型的理想化假设，往往难以精准映

射复杂孔隙网络中真实器件的宏观电化学行为。相比之下，海量的公开文献报道涵盖了极其宽广的化学空间与长周期的实验累积，构成了当前该领域最核心、最丰富的数据源。

从数据库构建的角度看，当前面向超级电容器研究的数据来源大致可分为三类：实验室内部标准化实验数据、文献挖掘数据以及高通量计算或模拟数据。三类数据源各具优势与局限，不宜简单以样本规模或获取难度进行优劣排序。实验室内部标准化数据的一致性最高，能够有效控制电解液体系、电极载量、测试协议等关键边界条件，因而最适合用于开展严格的变量效应分析、主动学习闭环优化与高置信度模型外推；但其主要局限在于样本规模有限、化学空间覆盖不足。文献挖掘数据的优势在于覆盖前驱体类型广、工艺路线多样、历史积累丰富，适合用于大范围候选筛选、跨体系规律提炼以及构建初始代理模型；其局限则在于实验口径异构、关键字段缺失和同源偏差显著，若缺乏严格的数据治理，极易削弱模型的可解释性与可迁移性。相比之下，高通量计算或模拟数据具有物理量定义清晰、标签标准统一等优点，适用于构建局域结构-界面相互作用-理论性能之间的基础映射，也可为机器学习势函数或机制模型提供训练样本；但其与真实复杂电极体系之间仍存在尺度与理想化假设差距，难以直接替代器件层实验数据。总体而言，若研究目标是进行材料初筛与全局规律发现，文献数据库更具效率优势；若目标是开展稳健预测与实验闭环寻优，则高一一致性实验数据库更具价值；若目标是建立机制解释或势函数训练基础，则计算或模拟数据库更具针对性。

在超级电容器领域，跨文献数据的核心痛点在于样本的高度异构性与实验口径的非标准化。不同研究在两电极与三电极测试体系、电解液类型与浓度、电极面载量、压实密度及电压窗口等关键边界条件上存在显著差异^[7]。若在数据集中遗漏上述关键数据，模型将极易把测试条件的系统性偏差误认为材料本征结构的构效规律，导致模型在单一数据源内呈现虚假的高拟合度，但在跨体系验证时泛化能力骤降。

因此，建立面向文献数据挖掘场景的分层最小信息集（如表1所示），是超级电容器数据库治理的关键。需要指出的是，跨文献数据天然存在字段

缺失、表征深度不一致与报告口径不统一等问题。若仅以信息完备性为唯一准则而简单剔除缺失样本，虽然能够提高数据表面的规范性，却会显著压缩样本规模并削弱化学空间覆盖范围；反之，若在关键边界条件缺失的情况下直接纳入建模，则容易使模型将测试体系差异或实验口径偏差误识别为材料本征规律。为在数据可用性与样本可比性之间取得平衡，表1中的信息可划分为“核心必填字段”与“扩展推荐字段”两级标准。其中，核心必填字段主要包括前驱体信息、工艺路线与参数、结构参数、电极参数、测试工况、评价体系标签、性能指标以及数据来源信息。这些字段直接决定样本是否具备进入主监督学习数据集的基本资格，是开展跨研究比较、构建代理模型与实施分组外推评估的必要前提。相较之下，扩展推荐字段可包括表面化学与缺陷、表征结果、不确定性标记以及失败样本标签等，其主要作用在于增强模型解释性、机制回证能力与闭环优化效率。对于核心字段缺失的样本，原则上不宜直接纳入主预测模型训练，但仍可保留用于定性归纳、案例统计或半监督/弱监督学习；对于扩展字段缺失的样本，则可在显式保留缺失标记的前提下，结合缺失指示变量、合理插补与敏感性分析开展建模，并评估不同缺失处理策略对预测结果稳健性的影响。

进一步地，建议按照信息完整度建立分级数据质量体系，例如将样本划分为A类（核心字段完整且扩展字段较丰富）、B类（核心字段完整但扩展字段部分缺失）和C类（核心字段不完整，仅用于辅助分析）三类，并分别报告样本保留率、字段缺失率、插补策略及不同质量层级下的模型性能。该分层治理框架有助于在保证模型可信度的同时，提高异构文献数据的利用效率。

此外，在数据集的拆分与评测机制上，传统随机划分方法极易引发同源泄漏问题，即共享相同前驱体来源、实验批次或文献背景的样本被同时分配至训练集与测试集，从而系统性高估模型的泛化能力。为更客观地评估模型的可迁移性，应优先采用基于文献来源、实验批次或前驱体类型的分组拆分策略，并进一步针对未知电解液体系、不同测试工况或未见材料类型实施严格的外推测试，以真实检验模型在复杂实际场景中的适用边界。需要强调的是，面向超级电容器的人工智能研究并不存在普适

最优的数据源、算法或验证手段。不同研究对象、样本规模、目标任务与机制深度要求，决定了数据库构建方式、模型架构以及表征/模拟路径的选择。应当具有明显的场景依赖性。因此，根据问题类型选择与之匹配的数据组织、建模策略和机制验证工具，相比追求更复杂的模型或更多的数据更重要。

表1 基于碳材料的超级电容器机器学习研究的最小信息集及其作用

Table 1 Minimal Information set for machine learning research on carbon-based supercapacitors

类别	最低必填字段	典型示例	主要作用
前驱体信息	前驱体类型、来源、元素组成、工业分析、结构组分	木质素、纤维素、农业废弃物、灰分、挥发分、固定碳	用于原料端筛选、解释成孔趋势和表面化学来源
工艺路线与参数	碳化温度、活化温度、保温时间、升温速率、活化剂类型与配比、模板策略、后处理条件	两步碳化、KOH化学活化、活化温度750℃、保温2h、升温速率5℃/min、KOH/碳前驱体质量比3:1、SiO ₂ 硬模板、酸洗去模板/去灰	决定孔结构形成、骨架重排和表面化学演化
结构参数	比表面积、总孔容、微孔体积、介孔体积、孔径分布、平均孔径	SSA、TPV、 V_{micro} 、 V_{meso}	表征可达储能位点与传输通道，是构效分析核心变量
表面化学与缺陷	元素含量、化学态比例、 I_p/I_G 、含氧官能团信息	N、O、S掺杂量，羧基、羟基	反映润湿性、界面吸附、赝电容与导电性张力
电极参数	载量、压实密度、厚度、黏结剂比例、导电剂比例、集流体类型	mg/cm ² 、g/cm ³ 、PVDF/PTFE	决定面积/体积性能、极化和器件可比性
测试工况	电解液类型、浓度、温度、电压窗口、电流密度/扫描速率	KOH、H ₂ SO ₄ 、有机电解液、WIS、电流密度	决定溶剂化/脱溶剂化、窗口上限和倍率行为
评价体系标签	两电极/三电极、对称/非对称器件、测试方法	GCD、CV、EIS	解决跨研究数据异构与评价口径不统一问题
性能指标	质量比电容、面积比电容、体积比电容、能量密度、功率密度、循环保持率、ESR/ R_{ct}	F/g、F/cm ² 、F/cm ³ 、Wh/kg	用于区分材料层、电极层和器件层目标
数据来源信息	文献来源、实验批次、样本归属	文献编号、数据批次号	用于分组拆分、避免同源泄漏
不确定性与异常标记	缺失值、重复样本、异常条件、失败样本标记	孔塌陷、极化严重、容量异常	提高模型可信度与风险识别能力

2.2 特征工程

特征工程是指运用材料科学的物理化学领域先验知识，将原始的实验与表征数据转化为能够被机器学习算法高效解析、且具有明确物理意义的特征描述符的过程。其核心目标在于降低高维特征空间的冗余度，提升模型对非线性构效关系的表达与学习能力^[30-31]。

针对基于碳材料的超级电容器，特征工程的设计原则应摒弃盲目的特征堆叠，转向对材料演化路径与电化学性能测试的共同映射。例如，若不将测试电解液体系、电流密度等工况变量引入特征矩阵，模型将无法识别同一孔径分布在水系与有机系电解液中截然不同的离子可达性，进而丧失跨体系迁移能力^[32]。从系统科学的角度，特征构建应遵循层次化原则，依次涵盖前驱体本征属性、工艺热力学/动力学参数、多尺度结构特征、表面化学与缺陷态、电极工程尺度参数以及动态测试工况。

在小样本量约束下，单纯依赖原始变量往往难以捕捉高维空间中的非线性耦合关系^[33]。通过引入

具备明确关联的组合特征（如温度与时间的积分、微孔体积的归一化占比等），能够显著降低特征空间的冗余度并提升预测精度。同时，在执行材料筛选与逆向设计任务时，必须严格划定特征提取的边界，避免将具有输出属性的表征结果（如电化学阻抗图谱、循环伏安特性）作为输入变量预测器件容量，以防止模型陷入以结果预测结果的统计学陷阱。

2.3 模型选择与评估

模型选择是指根据数据形态、样本规模及任务复杂度，匹配最优的算法架构以拟合材料特征与目标性能之间的高维非线性映射关系；评估则是通过严谨的统计学指标，量化模型在未知参数空间中的预测可靠性^[13]。

在超级电容器领域，当前的数据集通常呈现出中小规模、高维表格化及多源异构的典型特征。在此数据分布特征下，以随机森林（random forest, RF）、极致梯度提升算法（extreme gradient boosting, XGBoost）、轻量级梯度提升机算法

(light gradient boosting machine, LightGBM) 为代表的基于决策树^[34-35]的集成学习算法展现出了卓越的数据利用效率与鲁棒性,能够高效处理非线性交互作用与数据缺失问题,构成当前研究的首选强基线模型^[27]。相较之下,深度神经网络(deep neural networks, DNN)虽具备强大的高阶特征提取能力,但在中小型表格数据集中极易发生过拟合现象^[29]。只有当输入特征扩展至光谱图、显微图像或分子动力学轨迹等高维非结构化数据时,深度学习在表征学习层面的优势才得以充分释放。此外,多模型堆叠集成技术能够有效平滑单一算法的局部偏差,捕捉更为复杂的变量耦合机制^[36-37]。在评估体系上,单一的决定系数 R^2 无法全面反映模型的工程价值。严谨的评估框架必须引入平均绝对误差(mean absolute error, MAE)、均方根误差(root mean square error, RMSE)、交叉验证方差以及预测不确定性,以避免在置信度较低的外推区域输出误导性的材料合成建议^[38]。

2.4 闭环优化决策与多目标预测

上述涵盖“数据收集与治理—特征工程—模型选择与评估”的基础框架,已经构成了一个逻辑完备的标准人工智能预测 workflow,如图3所示,足以支撑对既有多孔碳材料体系的电化学属性评估与规律挖掘。然而,若研究的目标超越了对已有样本的被动预测,而是试图在庞大且未知的合成空间中主动创制高性能新材料,则需要在该标准流程的末端,引入作为补充与进阶环节的闭环优化决策模块^[9]。闭环优化决策是指将机器学习代理模型与主动搜索算法相耦合,在庞大的化学或工艺参数空间中,通过模型迭代预测与实验验证的相互反馈,高效逼近全局最优解的研究范式。必须强调,闭环优化并非每一项数据驱动研究的必经步骤,但它标志着人工智能的应用范式从被动的拟合正式跃迁至主动的目标导向逆向设计。这一进阶过程将机器学习代理模型与全局优化求解器深度耦合,实现在高维参数空间中进行高效、定向的迭代寻优。

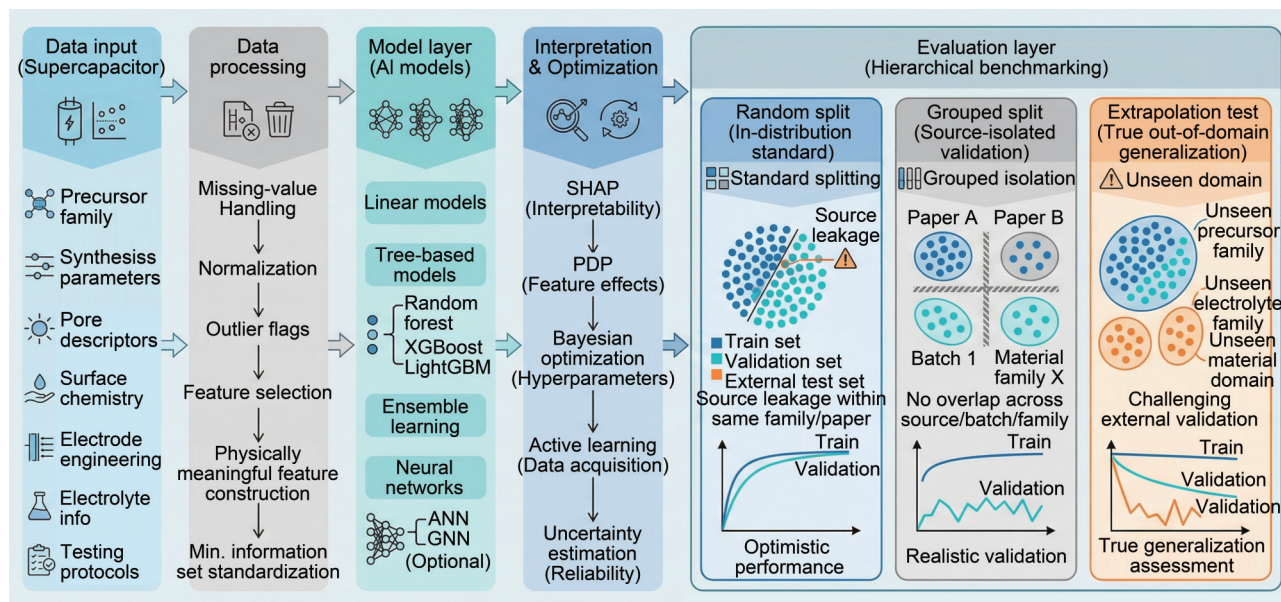


图3 超级电容器的AI建模与分层评测

Fig. 3 AI modeling and hierarchical evaluation for carbon-based supercapacitors

在多孔碳材料体系中,待优化变量通常同时包含连续变量和离散变量。前者如碳化温度、活化温度、保温时间和升温速率,后者如前驱体类别、活化剂种类和改性策略等。针对连续变量占主导的场景,贝叶斯优化^[39]因能够在高性能区域开发和不确定区域探索之间取得较好平衡,常被用于实验成本较高的小样本优化问题;而在变量空间离散、约束

复杂或存在多峰目标函数时,遗传算法等进化优化策略则具有较强的全局搜索能力^[40]。二者的共同前提在于:用机器学习代理模型代替大规模真实实验,对高维设计空间进行高效近似和迭代筛选。

对于超级电容器而言,优化目标往往并非单一性能指标^[25]。高能量密度、高功率密度、长循环寿命、低内阻和高压实密度之间通常存在内在权衡关

系，因此更符合实际需求的研究范式应是多目标优化，而非单目标极值搜索^[41]。在此背景下，帕累托前沿成为评价设计方案优劣的重要工具。通过构建不同目标之间的最优折中边界，研究者可以根据具体应用场景，在高功率输出、长寿命和高体积能量密度之间做出更具针对性的工程选择，而不是单纯追求某一单一指标的最大化。

闭环优化的另一关键在于负样本或失败样本的利用^[29]。在多孔碳材料开发过程中，孔隙塌陷、导电网络破坏、压实密度过低或倍率性能明显恶化等失败结果，并非应被剔除的无效数据，而是界定材料设计边界和工艺可行域的重要信息^[10]。若训练数据仅保留高性能样本，代理模型往往会高估设计空间的可行范围，并在实际实验中反复建议高风险路线。将失败样本纳入模型更新过程，有助于主动学习算法更准确地识别危险区域，缩小无效搜索空间，从而提高实验资源利用效率^[21]。值得指出的是，尽管失败样本在超级电容器材料设计中的潜在价值已得到越来越多的关注，但在多孔碳超级电容器领域，将失败样本作为独立知识回流更新模型的公开报道仍相对有限。现有代表性研究更多聚焦于闭环设计、候选筛选与实验验证，而对失败样本在模型迭代中的具体作用阐述仍不充分。作为具有代表性的通用材料发现案例，Raccuglia等^[42]将实验室笔记本中的失败或未获得目标产物的水热合成实验纳入训练集，用于预测反应成败，并在未见体系中实现了较高的实验命中率，说明失败样本能够有效帮助模型学习可行域边界并提升搜索效率。与多孔碳制备更为接近的相邻研究中，Yuan等^[43]在工程生物炭定向合成中采用主动学习策略，将每轮实验结果持续回流至模型进行再训练与再验证，从而在多轮迭代中逐步逼近目标孔结构与性能窗口。上述研究表明，负样本或低性能样本并非应被简单剔除的无效数据，而是界定设计边界、抑制模型过度乐观外推并提高闭环优化效率的重要信息载体。

总体而言，面向超级电容器的AI研究并非一般意义上的算法移植问题，而是受限于中小样本、高异构、强工况依赖等数据特征的材料信息学问题。现阶段真正具有方法学代表性的进展，主要体现在三个方面：一是通过最小信息集和分层治理提升跨文献数据的可用性；二是以树模型、物理先验约束和可解释分析为核心，提高中小样本条件下的预测

稳健性与规律提炼能力；三是将代理模型与主动搜索、实验反馈相结合，初步形成面向材料设计的闭环优化框架。与之相对应，当前最突出的瓶颈则在于数据标准缺失、外推评测不足以及失败样本利用不充分，这些问题直接决定了模型能否从可拟合进一步走向可迁移、可解释、可设计。

3 AI驱动的前驱体筛选与工艺参数优化

3.1 前驱体筛选

多孔碳材料的前驱体来源极其广泛且结构跨度巨大，涵盖了具备规则拓扑结构的金属有机框架(MOFs)、分子骨架可高度定制的合成聚合物(如酚醛树脂、聚苯胺)以及蕴含丰富芳环结构的化石燃料衍生物(如煤基体系)等^[44-45]。不同前驱体在元素组成、天然微观组织以及晶体结构上的本征差异，构成了后续碳化与活化造孔过程的初始热力学与动力学边界条件^[46]。这些基础属性直接约束了解析阶段的挥发分释放速率、碳骨架的收缩与重排行为，以及原生杂原子(如O、N、S)活性位点的保留机制。面对如此高维且离散的候选材料空间，传统经验试错范式面临严重的效率瓶颈^[9]。

近年来，依托大型语言模型(large language model, LLM)等先进AI技术对数以千计的异构学术文献进行大规模文本数据挖掘与标准化信息抽取，领域内已开始构建涵盖多元前驱体特征的高质量数据库。Li等^[47]基于235篇文献、2997条数据建立机器学习模型，对农业废弃物碳源进行快速评估，并进一步把筛选结果转化为具体制备路线，最终选择玉米秸秆并提出“一步活化+两步改性”方案；所得多孔碳电极比电容达到732.6 F/g，5000次循环后仍保持96%容量，组装的对称器件在1.0 A/g下可实现183.15 F/g、能量密度9.03 Wh/kg和功率密度22 kW/kg。这个案例的重要性并不只在于获得了高性能数值，更在于它证明了机器学习可以从原料排名进一步推进到原料与路线的联合建议，即把筛选置于实验之前，而不是在大量实验之后^[48-49]。这种全局性的数据驱动筛选机制有效打破了单一前驱体种类的经验壁垒，使研究人员能够在开展实验前，即可在多元体系中进行高通量评估，精准排除成孔潜力低下的候选物，将研发资源靶向导向具备优异结构可调性与界面活性的前驱体体系^[50]。

3.2 工艺参数优化与多目标约束

在确定前驱体体系后，工艺参数的优化需跨越单变量的局部极值搜寻，转而解析活化温度、保温时间、升温速率及活化剂配比等多维变量间的非线性协同效应^[51-52]。超级电容器的性能本质上受制于多重约束，极高的能量密度、优异的功率输出、长循环寿命及高压实密度之间存在着严格的性能博弈^[46]。因此，工艺优化不应局限于单一结构指标的放大，而必须转向基于代理模型构建多目标的帕累托前沿，输出满足特定边界条件的工艺参数区间^[53-54]。

将前驱体本征特性与工艺参数进行联合优化，可有效实现对器件宏观性能的前瞻性约束。Lu等^[55]以生物质原料的结构组分、工业分析、元素分析、活化条件和电流密度为输入，分别预测超级电容器的能量密度和功率密度，结果表明LightGBM在能量密度预测中取得 $R^2=0.922$ ，而XGBoost在功率密度预测中达到 $R^2=0.984$ ；沙普利加法解释(shapley additive explanations, SHAP)分析进一步指出，原料组成和活化条件对两类器件指标都具有关键影响，如图4(a)所示，前驱体中的固定碳、挥发分和灰分比例对器件功率密度具有关键的控制权重^[56]。针对界面反应复杂的水系超级电容器，Pan等^[41]在N/O共掺杂碳电极的研究中引入了带有物理先验约束的高斯过程回归模型，如图4(b)所示。研究表明，在酸性电解液体系中，盲目提高总比表面积并非提升性能的最优解^[57]；相反，协同提升介孔表面积并精准优化O/N掺杂比例^[28]，才是获得高电容输出的关键路径。这表明，面向实际工程的工艺优化，实质上是多参数协同演化与多目标物理约束的联合求解过程^[58]。

3.3 材料结构逆向设计与实验闭环

面对材料科学领域普遍存在的小样本、多变量数据局限，原始工艺特征的直接输入往往导致模型表达能力受限。通过特征工程构造具有明确物理化学意义的组合特征，是提升数据利用效率和模型预测边界的有效途径^[9]。

Xie等^[32]在木质素衍生纳米多孔碳的研究中，通过系统变换和组合原始特征生成了2025个候选特征，并筛选出30个高相关特征引入模型，显著提升了对比表面积(specific surface area, SSA)和总孔容(total pore volume, TPV)的预测能力；

最终模型对SSA和TPV的预测 R^2 均可达到0.99，并在外部泛化上保持 $R^2>0.85$ ，如图4(c)所示，同时解释性分析表明模型捕捉到的并不是随机统计噪声，而是具有物理意义的结构机制。在特征高维映射的基础上，人工智能正推动多孔碳的合成研究向逆向闭环设计演进^[59]。Sun等^[9]提出了一套针对生物质衍生多孔碳的闭环机器学习 workflow，将功能、结构和合成三者连接起来，通过文献挖掘构建数据集，并反向预测预碳化方式、物理状态、活化剂类型与用量、活化温度、时间和升温速率等7个关键合成参数。这种逆向推演从根本上改变了传统的研发范式，使得研究核心从被动评估已有配方转向基于性能目标主动生成高置信度制备路径。

需要指出的是，支撑上述逆向设计与多目标优化的基石是数据反馈闭环机制^[60]。在闭环实验验证中，导致孔隙塌陷、导电网络断裂或压实密度极度低下的失败样本具有不可替代的学术价值^[21]。它们在热力学与动力学层面上标定了多孔碳可行域的边界。若在数据迭代中剔除此类负样本，代理模型将丧失对高风险合成区域的感知与规避能力^[21]。只有将正负反馈样本同步纳入训练体系，利用主动学习算法不断收紧工艺设计空间，在多轮迭代中才能真正逼近可规模化制造的高质量多孔碳合成区域^[12]。

总体而言，AI驱动的碳源筛选与合成参数优化，正在把超级电容器研究从经验导向推进到多变量导向的新阶段，如表2、表3所示。其最具代表性的进展，不在于某一个模型取得了更高的 R^2 ，而在于研究范式发生了变化：筛选被前移到原料端，优化被写成多变量、多目标问题，特征工程被用于提升数据效率，而实验验证则不再是模型之后的附属步骤，而是设计闭环的一部分^[2]。只有在这一框架下，人工智能才真正有可能把超级电容器的合成开发，从离散的试错过程转化为机制牵引、数据约束和工程目标协同推进的系统设计过程。

4 电化学性能预测与构效关系解析

与前述AI基础 workflow 不同，电化学性能预测与构效关系解析并非单纯追求更高的拟合精度，其核心科学问题在于：人工智能是否能够从多源异构数据中识别出真正具有物理化学意义的关键描述符、非线性阈值及其适用边界，并进一步服务于材料设计与器件优化。基于此，本章不再对各类算法作平

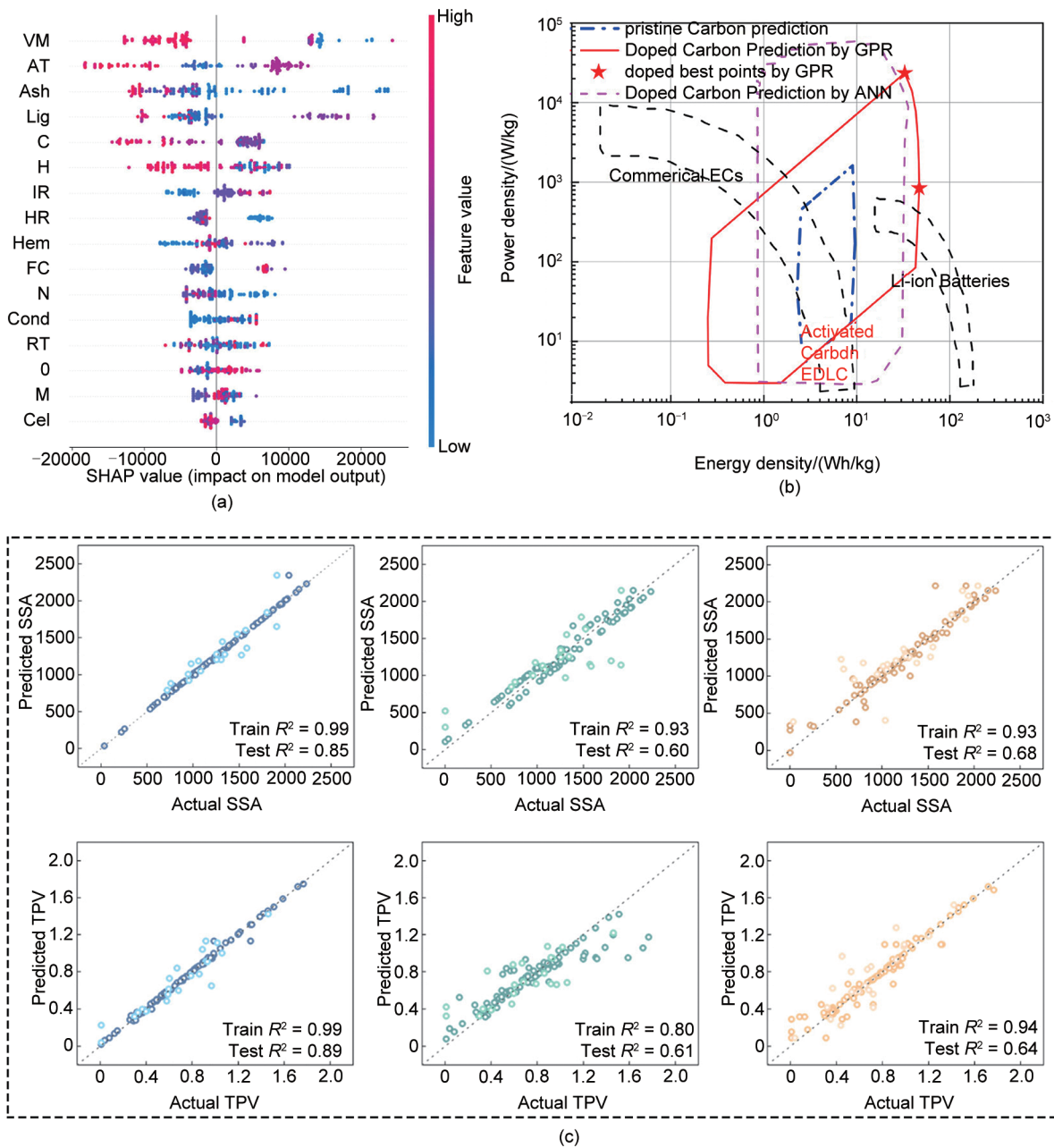


图4 (a) 预测功率密度的SHAP值分析^[65]。(b) 水系超级电容器的拉贡图，由氮/氧共掺杂碳电极组成，置于6 mol/L KOH或1 mol/L H₂SO₄电解质溶液中^[41]。红色实线由gARD-PhysGPR预测，紫色虚线是人工神经网络的预测，蓝色虚线对应纯碳电极的预测。红色星星突出显示最大能量密度和功率密度，这两者均在1 mol/L H₂SO₄电解质中获得。(c) 比较XGBoost、SVR和GBR在生成数据集上训练的SSA和TPV预测值与实际值^[32]

Fig. 4 (a) SHAP value analysis of predicted power density^[65]. (b) Ragone plot for aqueous supercapacitors consisting of nitrogen/oxygen-codoped carbon electrodes in 6 mol/L KOH or 1 mol/L H₂SO₄ electrolyte solution^[41]. The red solid line is predicted by the gARD-PhysGPR, the violet dashed line is the prediction of ANN, and the blue dashed line corresponds to that for pristine carbon electrodes. The red stars highlight the maximum energy density and power density, both obtained in the 1mol/L H₂SO₄ electrolyte. (c) Comparison of predicted and actual values for XGBoost, SVR, and GBR trained on the generated data set for SSA and TPV^[32]

行式铺陈，而是重点围绕三个方面展开：其一，AI如何解耦孔结构、表面化学、测试工况与储能行为之间的复杂非线性关系；其二，预测对象如何由材

料单一指标扩展至器件能量密度、功率密度和寿命等综合性能；其三，AI模型如何由静态性能预测进一步延伸至服役阶段的健康状态评估。需要强调的

表2 人工智能赋能超级电容器研究的代表性案例及其主要贡献

Table 2 Representative cases and their main contributions to AI-enabled supercapacitor research

研究类型	材料/体系	主要方法	主要输出	主要贡献
闭环设计	生物质衍生多孔炭 ^[5]	功能-结构-合成闭环机器学习	合成参数反推、结构与功能联动	展示了从目标性能/结构反推合成路径的闭环设计思路
预测+筛选+解释	多孔炭超级电容材料 ^[6]	机器学习+可解释分析	高性能多孔炭筛选	体现了预测、筛选与机制解释一体化的材料信息学框架
机理解释型	异质原子掺杂石墨烯 ^[9]	机器学习	掺杂协同与赝电容行为	说明N/S/O共掺杂存在协同区间,而非“掺杂越多越好”
材料发现型	富氧高孔隙炭 ^[12]	机器学习辅助材料发现	高性能候选材料发现	代表AI从预测已有样本走向提出并验证新材料路线
多尺度机制型	氮掺杂微孔炭 ^[28]	机器学习加速MD	掺杂化学态作用机制	说明二维模型结论在三维微孔中可能反转,强调化学态-孔限域-电解液体系
孔径窗口机制型	梯度孔炭/水系锌离子混合电容器 ^[24]	ML+MD+ML势函数	最优孔径窗口、逐级脱溶剂化机制	建立预测-模拟-机理解释证据链,是全文代表性案例
器件导向优化	木质素衍生物有序介孔炭 ^[51]	预测分析+绿色工艺	能量密度/器件性能	体现结构目标、工艺窗口与器件输出的一体化优化
特征工程型	木质素衍生纳米多孔炭 ^[32]	特征工程增强机器学习	SSA、TPV等结构参数预测	说明在中小样本条件下,特征工程可显著提升数据效率
可解释+稳定性型	生物质炭超级电容器 ^[21]	机器学习+SHAP/XAI	比电容与循环稳定性	揭示高比表面积可能牺牲长周期稳定性
原料筛选+实验闭环	农业废弃物衍生炭 ^[47]	大样本筛选+实验验证	原料端筛选、工艺建议	代表原料筛选前移到合成前端的闭环设计路线
可解释优化型	生物质衍生炭电极 ^[57]	CATBoost+SHAP/PDP	比电容窗口优化	给出活化温度、SSA、TPV、 I_p/I_c 等变量的定量窗口
器件健康预测型	商业超级电容器 ^[61]	多模态机器学习	SOH/寿命预测	说明融合循环电化学信号与材料特征可显著提升未见工况预测能力

表3 基于碳材料的超级电容器从材料层到器件层的多目标优化指标体系

Table 3 Multi-objective optimization index system for carbon-based supercapacitors: From material level to device level

层级	关键目标指标	典型矛盾	AI可发挥的主要作用	评价方式
材料层	比表面积、总孔容、微孔体积、孔径分布、掺杂量、化学态、导电性	高比表面积与低压实密度;高缺陷/高掺杂与导电性下降	特征筛选、窗口识别、结构-性能预测、掺杂/孔径反向设计	回归+XAI+多尺度模拟回证
电极层	载量、压实密度、厚度、黏结剂比例、ESR/ R_c 、润湿性	高载量/高压实密度与传输阻力增大;厚电极与极化加剧	多变量耦合分析、贝叶斯优化、工艺窗口推荐	多目标优化+SHAP/PDP
器件层	两电极比电容、面积/体积电容、能量密度、功率密度、循环保持率、自放电	高能量密度与高功率;高容量与长寿命;宽电压窗口与界面稳定性	器件级性能预测、工况优化、寿命建模、SOH预测	多目标回归+外推测试+寿命预测
制造与应用层	成本、绿色性、原料可得性、放大兼容性、批次稳定性	高性能路线与高成本;复杂工艺与规模化难度	原料筛选、工艺简化、供应链质量管理控制、可制造性评估	生命周期与成本约束下的多目标优化

是,当前该领域最具代表性的进展,并不在于某一模型取得更高的 R^2 ,而在于人工智能正逐步推动超级电容器研究从经验相关性拟合走向对关键变量边界、耦合机制及工程适用条件的系统识别。

4.1 复杂非线性构效关系的解耦与机制解释

传统的构效关系解析多依赖于单变量控制法或简单的线性相关性分析。然而,基于碳材料的超级电容器的储能行为受多级孔隙分布、表面化学态、

极片压实密度及电解液溶剂化结构的深度耦合影响,呈现出典型的复杂高维非线性特征^[62]。单纯依赖线性拟合极易导致伪相关性的产生,例如将比表面积的增加等效为比电容的绝对提升,而忽略了有效孔径与离子的空间位阻效应^[63]。近年来,融合XAI的预测模型为解耦这一复杂体系提供了变革性工具^[15,28]。通过引入SHAP、部分依赖图(partial dependence plots, PDP)等特征归因算法,如图5

所示，研究人员能够分析各材料描述符在特定测试条件下的贡献与影响^[6]。例如，Mishra 等^[14]基于大规模异构数据集的 XAI 分析证实，比表面积与比电容之间仅在特定区间内保持正相关；当存在过量极微孔 (< 0.7 nm) 或测试处于高频大电流密度时，受限的离子传输动力学会导致高比表面积的储能贡献急剧衰减

甚至呈现负相关。在此基础上，针对杂原子掺杂机制的解释性模型进一步揭示，氮、氧官能团的协同增益并非呈线性单调递增，而是受到碳骨架本征缺陷度（如 I_D/I_G 比值）的热力学约束。这种基于数据驱动的非线性解耦，使得构效关系的研究从经验性的定性描述迈向了基于阈值与边界条件的定量解释^[24]。

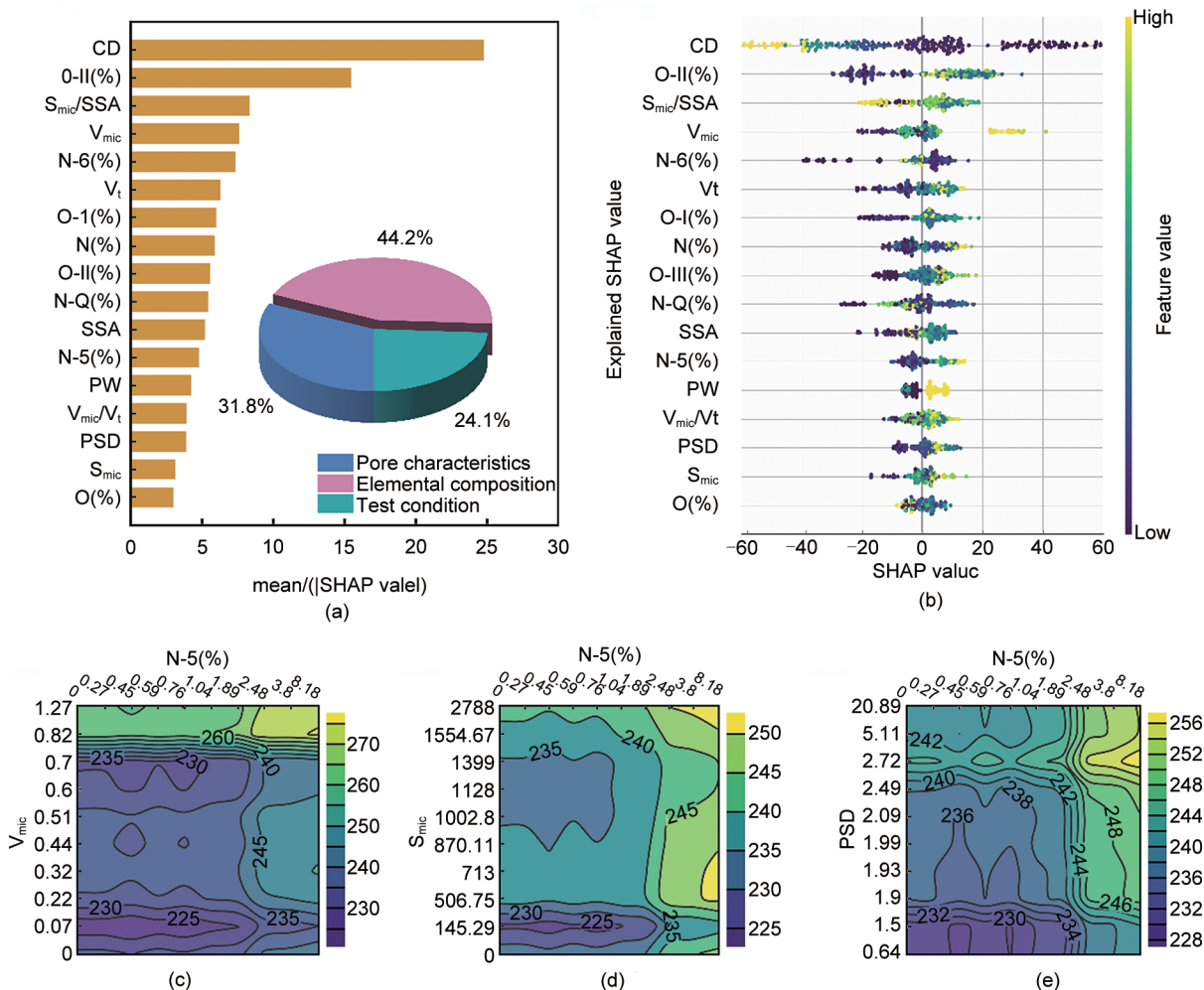


图 5 特征重要性分析^[6]。(a) 变量间相对贡献的顺序，(b) 从 LGBM 模型获得的目标 (SC) 的特征重要性 SHAP 值。二维部分依赖图 (c) N-5% 和 V_{mic} ，(d) N-5% 和 S_{mic} ，(e) N-5% 和 PSD

Fig. 5 Feature importance analysis^[6]. (a) Order of relative contribution among variables, (b) SHAP values of feature importance of targets (SC) obtained from LGBM model. Two-dimensional partial dependence plots of (c) N-5% and V_{mic} , (d) N-5% and S_{mic} , (e) N-5% and PSD. SC: specific capacitance; LGBM: light gradient boosting machine; PSD: pore size distribution

4.2 器件级宏观电化学性能的精准预测

在电化学性能预测层面，人工智能的介入正推动研究重心从材料级单一指标向面向工程实际的器件级多维宏观指标发生转移^[57]。由于最终器件的输出性能不仅取决于碳材料的本征属性，更受制于电极参数与测试条件的共同约束，建立跨越材料—电

极—器件的联合预测模型成为必然趋势^[28]。多项研究表明，集成树模型（如 random forest、XGBoost）在处理此类包含连续变量与离散类别标签的复合数据集时，表现出卓越的鲁棒性与极高的预测精度^[1]。以 Lu 等^[55]的工作为例，将多孔碳的前驱体组分、制备工艺与测试电流密度进行联合高维

特征编码, 所构建的代理模型对组装器件的功率密度预测精度高达 $R^2=0.984$ 。特征敏感性分析进一步指出, 在给定的碳材料微观结构下, 电压窗口的拓宽幅度与电解液的离子电导率在决定高能量密度输出时的特征重要性, 甚至超越了碳材料本身的部分结构参数^[64]。

作为该领域的早期探索, Zhu等^[65]从逾千篇已发表论文中提取了10000余个数据点, 选取比表面积、计算孔径、 I_p/I_c 比、氮掺杂量和电压窗口作为特征变量, 系统比较了线性回归、最小绝对收缩和选择算子 (least absolute shrinkage and selection operator, LASSO) 回归与人工神经网络 (artificial neural networks, ANN) 的预测能力, 如图6(a)所示。结果显示, ANN在强非线性样本 (如低比表面积、高氮掺杂材料) 中的预测误差仅为3.3%, 而线性方法的误差接近90%, 这从数据层面证实了器件级性能预测必须采用非线性建模方法的必要性。然而, 受限于可解释性方法的缺乏, 该研究未能进一步揭示各特征变量在不同条件下的贡献边界与耦合阈值。

值得注意的是, 机器学习在超级电容器领域的应用已从性能预测拓展至实验验证的双向闭环。Rehman等^[66]在对ZnS-CoS纳米颗粒电极的电化学研究中, 创新性地堆叠回归器、基于树的流水线优化工具 (tree-based pipeline optimization tool, TPOT)、ANN及响应曲面法 (response surface methodology, RSM) 四种模型用于验证实验测得的比电容。结果表明, 堆叠回归器取得了最高的预测精度 ($R^2=0.67$, RMSE=0.28), 而RSM表现最差 ($R^2=0.46$), 模型性能排序为: 堆叠回归器>ANN>TPOT>RSM, 如图6(c)所示。更重要的是, 该研究通过DFT计算获得的带隙值与EIS测得的电荷转移电阻相互印证, 形成了从DFT计算到实验电化学表征再到机器学习性能验证的完整闭环。这一结果表明: 机器学习不仅可以用于筛选高性能材料, 还可以作为实验结果的独立验证手段, 从而提升研究结论的可靠性与可复现性。

综上所述, 高性能超级电容器的设计不能仅局限于电极材料结构的研究, 而必须在算法指导下实现电极构型、电解液体系与器件工况的系统级全局适配。

4.3 面向全周期的健康状态与寿命预测

需要说明的是, 健康状态 (state of health, SOH) 与循环寿命预测并不直接属于多孔碳材料结构设计的核心范畴, 而主要体现了人工智能在超级电容器研究中由材料层、电极层进一步向器件层与服役层延伸的应用方向^[67]。将该部分纳入本文讨论, 目的并非将商业超级电容器的运行诊断等同于多孔碳材料设计本身, 而是为了说明: 当人工智能完成对材料构效关系、工艺窗口与器件初始性能的建模之后, 其应用边界还可进一步扩展至器件全生命周期管理, 包括健康状态评估、寿命衰减预测及运行工况优化等关键任务^[61]。对于面向实际工程部署的超级电容器系统而言, 材料设计、器件构型优化与服役状态诊断本质上构成连续衔接的多层级研究链条, 因此, 器件层的SOH预测可被视为人工智能赋能超级电容器研究的重要延伸场景, 但其关注重点已由多孔碳材料设计转向器件在长期运行中性能演化的评估和管理^[68]。

Doucet等^[69]提出了一种基于机械形变监测的非侵入式SOH评估方法, 该研究针对商用碳基超级电容器 (Eaton XV3560-2R7407-R, 400 F, 2.7 V), 在50°C和60°C加速老化条件下进行了长达60天的循环测试, 并创新性地将应变片集成于器件外壳的泄压区, 实时捕捉因内部气体累积导致的形变, 通过将气体吸附理论引入超级电容器老化建模, 建立了具有可解释性和跨工况稳定性的预测模型, 如图6(b)所示。Komarsofla等^[61]针对7种不同的商业超级电容器样本, 执行了超过70000次严苛的充放电循环老化测试, 并创新性地构建了融合高频电学时间序列与极片物理特征 (如孔隙率、电极厚度、热稳定性指标) 的混合机器学习架构。实验结果表明, 在引入材料特征后, 所有基线模型的跨工况预测性能均获得显著提升, 其中多层感知机 (multi-layer perceptron, MLP) 在处理未见过的数据集时, 取得了高达 $R^2=0.941$ 的预测精度。特征剥离实验进一步证实, 碳电极的孔隙保留率与极片厚度是中后期容量非线性突降现象的决定性描述符。

上述研究表明, 真正具有泛化能力的器件寿命诊断, 必须建立在材料结构-工况负载-宏观容量的联合建模之上。但应指出, 此类研究的主要目标在于器件服役行为预测与健康状态管理, 其对多孔碳材料设计的贡献更多体现为提供面向长期稳定性与工程

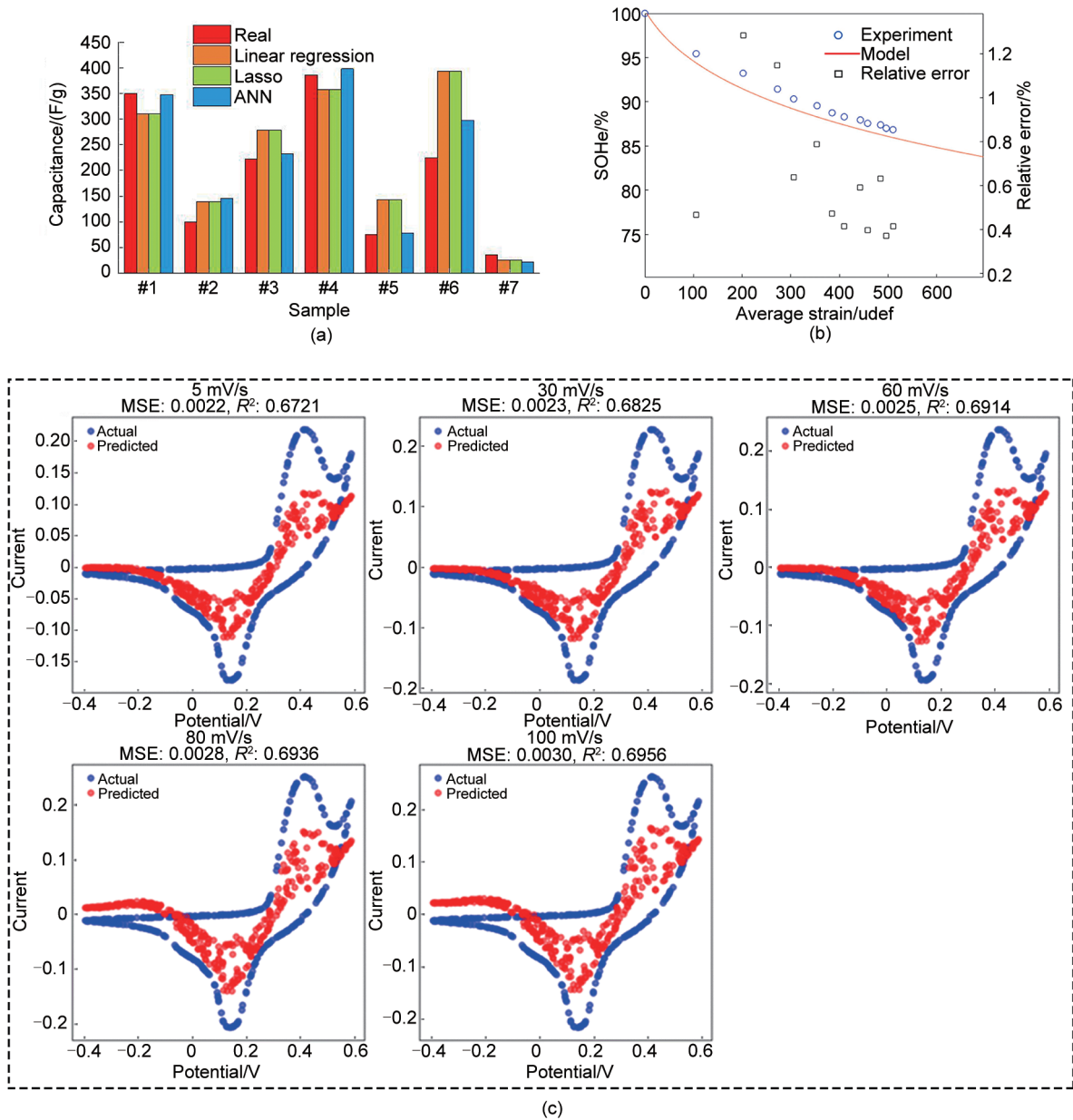


图 6 (a) 实际电容与三种模型预测值之间的比较^[70]。(b) SoH_e 的实验和模型数据^[69]。(c) 实验结果与不同扫描速率下堆叠回归器模型预测的比较^[66]

Fig. 6 (a) The comparison between real capacitances and the predictions of three models^[70]. (b) Experimental and model data of SoH_e^[69]. (c) Comparison between the experimental results and the stacking regressor model predictions at different scan rates^[66]

适用性的外部约束，而非直接给出孔结构或表面化学的反向设计方案。

5 AI辅助多尺度模拟

前述基于文献和实验数据的机器学习模型，能够高效建立多孔碳结构特征与宏观电化学性能之间的统计映射，但其主要局限在于难以回答“为什么该变量在特定条件下有效”以及“这种规律是否具

有可迁移的物理基础”等更深层问题。因此，AI辅助多尺度模拟在本领域中的意义，并不只是为传统DFT或MD引入新的计算工具，而在于为数据驱动模型识别出的关键描述符、非线性边界与反常现象提供原子尺度和界面尺度的机制回证。换言之，该方向最重要的进展，是推动超级电容器研究从相关性预测走向机制约束下的可解释设计；而其核心瓶颈，则在于高保真训练数据不足、真实复杂界面难

以被理想模型充分表征,以及模拟结果与实验表征之间仍缺少标准化闭环验证路径^[71-72]。

在基于碳材料的超级电容器固液界面动力学研究中,传统的计算化学方法长期受困于计算精度与尺度的内在矛盾。基于密度泛函理论的从头算分子动力学能够精确求解电子结构演化、电荷转移以及界面的动态极化效应,但其计算复杂度通常呈 $O(N^3)$ 标度^[73]。这导致其空间与时间尺度被严苛限制在数百个原子与皮秒量级,难以对多孔碳复杂网络中的离子长程扩散及统计热力学行为进行有效的相空间采样。相对而言,经典分子动力学能够模拟百万级原子体系并延伸至纳秒尺度,但其高度依赖半经验力场。传统经验力场受限于固定的点电荷分配与简化的谐振子近似,无法准确描述电解液离子在进入亚纳米限域孔隙时发生的电荷重新分布、溶剂化壳层畸变以及碳骨架的诱导极化行为^[74]。

机器学习势函数的引入为突破这一瓶颈提供了可行方案。通过提取局部原子构型的对称性函数或多体拓扑描述符作为输入特征,基于高维神经网络或等变图神经网络构建的原子间势能面代理模型,能够以接近第一性原理的极高精度驱动大尺度分子动力学模拟。在多孔碳储能体系中,机器学习势函数的核心价值集中体现于对复杂固液界面非理想相互作用的高保真刻画。以强极性水系电解液或高浓度盐包水体系为例,机器学习势函数能够准确模拟电解液离子在进入亚纳米孔隙时的逐步脱溶剂化轨迹,定量求解该限域过程伴随的局部介电常数衰减与界面重构能垒。此外,针对异质原子掺杂的多孔碳体系,机器学习势函数能够精确映射掺杂位点诱导的局域电场微扰与动态电荷补偿机制,从而在真实的统计力学时空尺度下,还原表面法拉第电容反应的瞬态动力学特征。

依托高精度的机器学习势函数,超级电容器理论正在形成贯穿底层的多尺度耦合模拟框架。在该框架中,人工智能不仅作为势函数的算力底座,更发挥着跨尺度参数化映射的核心作用^[75]。超级电容器的储能行为跨越了量子力学的态密度分布、介观尺度的双电层拓扑重构以及宏观多孔电极的连续传质过程。通过机器学习算法对海量大尺度分子动力学轨迹进行相空间降维与粗粒化模拟,研究人员能够高效获取离子在特定多孔网络下的有效扩散张量与界面电容统计均值,并将其直接作为连

续介质动力学方程的高保真边界输入,从而大幅降低了宏观多孔电极模型对经验常数的依赖^[64]。这种框架使得底层物理定律与数据科学得以深度结合,推动了基于碳材料的超级电容器研发从唯象参数拟合跃迁为具备可解释性的数据导向设计阶段。

进一步来看,表征与机制验证手段之间同样不存在单一最优方案,而应服务于不同层级的问题诊断需求如表4所示。对于孔结构与可达储能位点分析, N_2 吸附脱附测试、孔径分布分析和电子显微表征能够提供多孔碳宏观孔结构与局域形貌信息,适用于建立孔结构描述符与电化学性能之间的初始关联;但这类方法对真实工作状态下离子在限域孔中的动态行为表征能力有限。对于表面化学与缺陷态分析,XPS、拉曼和元素分析能够识别杂原子含量、化学态分布及缺陷程度,是解释润湿性、赝电容贡献及其与导电性之间权衡关系的重要依据;其局限在于多数结果仍属于静态后验表征,难以单独证明储能过程中界面反应的动态路径。相较之下,原位表征、电化学阻抗谱及多尺度模拟更适用于追踪离子传输、界面重构与反应动力学,是将AI识别出的关键变量进一步提升为机制命题的重要工具。其中,DFT更适合回答局域位点电子结构与吸附能问题,MD更适合刻画溶剂化、脱溶剂化及离子在孔道中的动态行为,而机器学习势函数则试图在精度与尺度之间取得平衡。总体而言,常规表征更适合用于构建结构描述符与形成初步构效关联,原位表征与多尺度模拟更适合用于机制回证与边界条件识别;二者只有在AI给出的关键变量或反事实假设牵引下协同使用,才能真正提升综述对研究设计的指导价值。

6 结论、挑战与未来展望

6.1 结论

超级电容器因其高功率密度、快速充放电、长循环寿命和较好安全性,在功率型储能领域始终占据重要位置;但其进一步发展长期受限于材料结构高度复杂、构效关系强耦合以及实验试错成本较高等问题。本文围绕“数据—模型—机制—优化”这一主线,系统综述了人工智能在基于碳材料的超级电容器领域的研究进展,阐明了该领域的研发范式正经历从传统的经验试错向数据约束与机制牵引的跃迁。综合现有研究可以看出,人工智能的价值已

表 4 面向多孔碳超级电容器研究的主要数据库、模型与机制验证手段的优劣及适用场景比较

Table 4 Comparison of major data sources, models, and validation methods for porous carbon supercapacitor research

类别	代表类型	主要优势	主要局限	更适合的任务场景
数据源	实验室内部标准化实验数据	一致性高、边界条件明确、利于闭环优化	样本量有限、覆盖范围较窄	工艺优化、主动学习、外推验证
数据源	文献挖掘数据库	样本丰富、覆盖面广、适合初筛	异构性强、缺失多、同源偏差显著	候选筛选、宏观规律提炼、初始代理模型
数据源	高通量计算/模拟数据	标签定义清晰、适合机制变量学习	与真实器件体系存在理想化差距	势函数训练、局域机制研究、理论映射
模型	线性回归/LASSO	简洁、可解释、适合基线比较	难以处理强非线性耦合	基线建立、方向性判断、特征预筛选
模型	RF/XGBoost/LightGBM	适合中小样本表格数据、鲁棒性强、易结合 XAI	对高维非结构化数据优势有限	性能预测、变量筛选、窗口识别
模型	GPR/贝叶斯优化	可表达不确定性、适合小样本寻优	高维大样本下计算代价较高	主动学习、闭环实验设计
模型	DNN/深度学习	适合图像、谱图、轨迹等复杂数据	小样本表格任务易过拟合、解释性弱	非结构化数据学习、多模式融合
表征/验证	BET/孔径分析/显微表征	适合建立孔结构描述符	难反映真实工作状态界面过程	结构表征、构效关联初步建立
表征/验证	XPS/拉曼/元素分析	适合分析化学态、缺陷与掺杂	多为静态后验信息	表面化学解释、缺陷定量
表征/验证	原位表征	能追踪动态界面演化	实验复杂、通量较低	机制回证、反应路径分析
表征/验证	DFT	适合局域位点与电子结构分析	尺度受限	吸附能、局域反应位点解释
表征/验证	MD/ML 势函数	适合动态离子行为与限域输运分析	依赖势函数质量，复杂体系泛化仍受限	溶剂化、脱溶剂化、孔道传输机制

不再局限于对比电容的经验预测，而是逐渐延伸到前驱体筛选、工艺参数优化、孔结构与表面化学解释、界面储能机制解析以及器件健康状态诊断等多个层面。通过物理先验约束、特征工程与多尺度模拟的融合，数据驱动方法正逐步破除复杂界面电荷存储系统的统计学黑箱，为开发高功率、长循环寿命的先进电化学储能器件提供了系统性的方法学支撑。未来，人工智能在多孔碳超级电容器领域的真正突破，不仅取决于模型预测精度的提升，更取决于能否建立以高质量数据治理、稳健泛化评测和机制闭环验证为核心的新型研究范式。

6.2 挑战与展望

尽管数据驱动方法展现出变革性的潜力，但基于碳材料的超级电容器的智能化研发仍处于跨越式发展的初期，领域内依然面临数据异构、机制割裂与工程转化脱节等深层次挑战，如表 5 所示。未来若要推动该方向从统计相关性拟合进一步走向可迁移、可解释和可闭环优化的材料设计，至少应在以下四个方面实现实质性突破。

首先，应从数据收集进一步转向最小信息集约束下的数据治理体系建设。当前限制模型质量的首要问题，并非样本数量绝对不足，而是跨文献数据在测试体系、电极参数、电解液条件和结构表征粒

度上的强异构性。未来数据库建设不应停留于汇总比表面积、孔容和比电容等结果性指标，而应围绕前驱体信息、关键工艺参数、电极参数、测试工况、评价体系标签和性能指标构建面向机器学习的最小信息集，并进一步引入“核心必填字段—扩展推荐字段”的分层标准^[79]。同时，应建立面向文献数据的质量分级与缺失显式建模策略，将样本划分为可用于主监督学习、高置信度对比分析和辅助统计归纳的不同层级，避免因关键字段缺失而使模型学习到虚假的构效规律。未来真正高价值的数据库，不仅应包含成功样本，也应逐步纳入失败样本、异常样本及其对应边界条件，以支撑对设计可行域的系统学习。

其次，应从同分布条件下的高精度拟合转向面向外推场景的泛化评测与稳健建模。当前不少模型在随机划分测试集上取得较高精度，但这并不等同于其具备跨前驱体、跨电解液或跨测试工况的可迁移能力。未来的研究应系统引入基于文献来源、材料类型、前驱体类别或实验批次的分组拆分策略，并将未知电解液体系、未知工艺窗口、未知材料类型下的外推测试作为更高层级的基准任务。同时，模型构建不应再只报告 R^2 、MAE 或 RMSE 等指标，而应同步报告不确定性估计、校准能力及高风险区

域识别能力。对当前领域而言，树模型、概率模型与物理先验约束模型之所以仍具有较高方法学价值，正是因为它们在中小样本、强异构数据条件下更容易形成稳健的泛化边界；而未来更值得推动的方向，是将多模态学习、迁移学习与不确定性约束相结合，使模型能够在有限高质量数据基础上实现跨体系迁移，而不是仅在单一数据库内部提高拟合度。

再次，应推动机制研究从描述符重要性排序迈向“AI假说—模拟解析—原位表征回证”的协同闭环。当前大量解释性研究仍停留在SHAP值、PDP图或特征重要性排序层面，这类结果虽然有助于识别关键变量，但尚不足以直接构成可证伪的物理化学命题。未来更具前瞻性的研究路径，应当是由AI模型首先提出具有边界条件的机制假说，例如“某一孔径窗口仅在特定溶剂化状态下有效”或“某类杂原子化学态的正效应依赖于介孔/微孔比例及电解液环境”；随后借助DFT、MD或机器学习势函数对局域吸附、脱溶剂化和离子输运过程进行多尺度解析；最后再通过原位表征技术对界面结构演化和动态反应路径进行实验回证^[29, 76]。只有在数据驱

动识别、计算模拟解释、动态表征验证三者形成闭环的条件下，人工智能才有可能从经验规律提炼工具进一步升级为机制牵引的设计工具。

最后，应面向真实工程目标，构建融合失败样本回流、多目标约束和自动化实验的闭环优化平台^[21]。面向应用的多孔碳超级电容器设计，不能再以单一质量比电容为核心优化目标，而应同时考虑压实密度、面积/体积性能、倍率特性、循环寿命、自放电、成本与绿色性等多重约束。未来的闭环设计平台应以代理模型为中枢，将前驱体筛选、工艺参数优化、器件评价和实验反馈纳入统一框架，并保留孔隙塌陷、导电网络退化、极化异常增大等失败样本信息，使模型能够主动识别高风险区域和不可行设计边界。在此基础上，结合贝叶斯优化、主动学习和自动化合成/测试平台，逐步实现由“人工提出候选—实验逐个验证”向“模型生成候选—机器人执行实验—结果实时回流更新”的研发模式转变^[7]。需要强调的是，自动化平台的价值并不只是提升实验通量，更在于为模型提供边界清晰、标签一致、可持续积累的高质量反馈数据，从而形成真正意义上的自进化闭环系统。

表5 人工智能赋能基于碳材料的超级电容器研究的主要挑战

Table 5 Main challenges in AI-driven carbon-based supercapacitor research

主要挑战	具体表现	可能后果	对策
数据异构严重	两电极/三电极混用，电解液、窗口、载量、压实密度记录不全	模型学习到工况差异而非材料规律	建立最小信息集，统一字段与单位
评价口径不统一	只报质量比电容，忽略面积/体积指标和器件条件	高比电容结果难转化为工程价值	同步报告质量、面积、体积和器件级指标
随机拆分高估泛化	同一论文/批次样本泄漏到训练集和测试集两侧	测试精度虚高，外推失效	引入分组拆分、留一体系外推和不确定性评估
结构描述符过粗	仅记录总N/O含量，缺少化学态比例、孔限域语境	难以解释掺杂与孔结构的真实作用	强化化学态、孔结构上下文和电解液信息编码
XAI停留在特征排序	只给重要性图，不形成可证伪命题	难以转化为机制认知与实验计划	结合PDP/交互分析、DFT/MD和对照实验回证
模型与机制脱节	预测精度高，但缺少原位表征或模拟验证	设计建议可信度不足	建立AI—模拟—原位表征验证体系
器件导向不足	过度关注材料层峰值性能，忽略寿命、阻抗和可管理性	难以进入真实应用场景	发展器件级多目标优化和SOH预测
闭环优化不足	模型、实验、表征分离，失败样本未回流	研发迭代慢，边界条件学习不足	推动主动学习、贝叶斯优化与自动化实验闭环
自动化与数字化基础薄弱	数据标准不统一、平台不兼容	难形成真正的数字化研发基础设施	建设共享数据库、评价基准和自动化实验平台

总体而言，人工智能赋能多孔碳超级电容器研究的下一阶段，不应仅以更高的预测精度为目标，而应以高质量数据基础上的稳健泛化、机制可证伪条件下的解释增强，以及工程约束导向下的闭环优

化为核心标志。只有当数据库、模型、机制验证与实验平台在同一逻辑框架下协同演进，人工智能才可能真正推动该领域从相关性拟合走向可迁移、可验证、可放大的材料设计与器件开发。

参考文献

- [1] PAN X X, LI W K, LAI X T, et al. Electrolyte design strategies for next-generation supercapacitors and metal-ion batteries[J]. *Emergent Materials*, 2025, 8(8): 6843-6917. DOI: 10.1007/s42247-025-01284-5.
- [2] MAHMOUDI-QASHQAY S, ZAMANI-MEYMIAN M R, MALEKI A, et al. Fabrication of an asymmetric supercapacitor using a novel electrode design and introduce a robust machine learning model for its performance evaluation[J]. *Journal of Power Sources*, 2024, 613: 234911. DOI:10.1016/j.jpowsour.2024.234911.
- [3] CHOUDHARY N, TOMAR A, BHARDWAJ S, et al. Advancements in biomass-derived cellulose composite electrodes for supercapacitors: A review[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2025, 13(6): 4012-4042.
- [4] YUKSEL K, EROGLU D, YILDIRIM R. Key aspects of sustainable and high-performance K-ion batteries: A machine learning approach[J]. *Journal of Power Sources*, 2025, 657: 238215. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2025.238215.
- [5] SUN X T, UNIVERSITY C S, LI R L, 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. DOI:10.1021/acssuschemeng.4c08492.
- [6] LIU H W, CUI Z M, QIAO Z N, et al. Machine learning-assisted prediction, screen, and interpretation of porous carbon materials for high-performance supercapacitors[J]. *Journal of Materials Informatics*, 2024, 4(4): DOI:10.20517/jmi.2024.29.
- [7] LI H T, YAN Q C, LI J H, et al. Porous carbon materials: From traditional synthesis, machine learning-assisted design, to their applications in advanced energy storage and conversion[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 35(33): 2504272. DOI: 10.1002/adfm.202504272.
- [8] YI Z L, ZHOU Y, LIU H, et al. Predicting practical reduction potential of electrolyte solvents via computational hydrogen electrode and interpretable machine-learning models[J]. *npj Computational Materials*, 2025, 11: 135. DOI: 10.1038/s41524-025-01582-w.
- [9] CHENWITTAYAKHACHON A, JITAPUNKUL K, NAKPALAD B, et al. Machine learning approach to understanding the 'synergistic' pseudocapacitive effects of heteroatom doped graphene[J]. *2D Materials*, 2023, 10(2): 025003. DOI:10.1088/2053-1583/acaf8d.
- [10] LIU P, GE Y, LI H H, et al. New insights into the performance of biomass carbon-based supercapacitors based on interpretable machine learning approach[J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 118: 116300. DOI:10.1016/j.est.2025.116300.
- [11] HONDA T, MUROGA S, NAKAJIMA H, et al. Virtual experimentations by deep learning on tangible materials[J]. *Communications Materials*, 2021, 2: 88. DOI: 10.1038/s43246-021-00195-2.
- [12] WANG T, PAN R T, MARTINS M L, et al. Machine-learning-assisted material discovery of oxygen-rich highly porous carbon active materials for aqueous supercapacitors[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 4607. DOI: 10.1038/s41467-023-40282-1.
- [13] RAHIMI M, ABBASPOUR-FARD M H, ROHANI A. A multi-data-driven procedure towards a comprehensive understanding of the activated carbon electrodes performance (using for supercapacitor) employing ANN technique[J]. *Renewable Energy*, 2021, 180: 980-992. DOI:10.1016/j.renene.2021.08.102.
- [14] MISHRA S, SRIVASTAVA R, MUHAMMAD A, et al. The impact of physicochemical features of carbon electrodes on the capacitive performance of supercapacitors: A machine learning approach[J]. *Scientific Reports*, 2023, 13: 6494. DOI: 10.1038/s41598-023-33524-1.
- [15] LIU H W, CUI Z M, SUN Y, et al. Synergistic design and synthesis of O, N Co-doped hierarchical porous carbon for enhanced supercapacitor performance[J]. *Energy Materials*, 2025, 5(3): DOI:10.20517/energymater.2024.101.
- [16] ZHOU M S, VASSALLO A, WU J Z. Data-driven approach to understanding the In-operando performance of heteroatom-doped carbon electrodes[J]. *ACS Applied Energy Materials*, 2020, 3(6): 5993-6000.
- [17] GUO J C, CHAI Y F, HONG C C, et al. Prediction of the low-temperature properties of electrolyte solvents for lithium-ion batteries via machine learning[J]. *Nanoscale*, 2026, 18(5): 2613-2624. DOI:10.1039/d5nr03942h.
- [18] DONG Y W, LIU Y T, MAO F F, et al. Energy storage in supercapacitor researches: Interdisciplinary applications from molecular simulations to machine learning[J]. *Applied Energy*, 2025, 393: 126074. DOI:10.1016/j.apenergy.2025.126074.
- [19] MCCUSKER L B, LIEBAU F, ENGELHARDT G. Nomenclature of structural and compositional characteristics of ordered microporous and mesoporous materials with inorganic hosts (IUPAC recommendations 2001) [J]. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2003, 58(1): 3-13. DOI: 10.1016/S1387-1811(02)00545-0.
- [20] CUI Z M, LIU H W, AN X K, et al. Synergistic regulation of carbonyl oxygen active sites and micropores in lignite-derived porous carbon for high-performance supercapacitors[J]. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2025, 997: 119488. DOI:10.1016/j.jelechem.2025.119488.
- [21] GHOSH S, SIBI A, THOMAS T. Machine learning and explainable artificial intelligence reveal physical insights into biomass-derived carbon for high-performance supercapacitors[J]. *Journal of Power Sources*, 2026, 665: 239040. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2025.239040.
- [22] TAWFIK W Z, SHABAN M, RAVEENDRAN A, et al. Insights into the specific capacitance of CNT-based supercapacitor electrodes using artificial intelligence[J]. *RSC Advances*, 2025, 15(5): 3155-3167.
- [23] DUBEY R, GURUVIAH V. A data-driven approach for evaluation of electrolyte informatics on electrochemical performance of carbon-based electrode materials[J]. *Ionics*, 2022, 28(5): 2169-

2183. DOI:10.1007/s11581-022-04480-z.
- [24] ZHANG Y F, TIAN J, LI G Y, et al. Design principles for gradient porous carbon on aqueous zinc-ion hybrid capacitors: A combined molecular dynamic and machine learning study[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2025, 17(2): 3448-3456. DOI: 10.1021/acsami.4c19397.
- [25] SHRIVAS S, DUBEY A. Prediction of specific capacitance of activated carbon electrode for energy storage device by machine learning based approach[J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 121: 116632. DOI:10.1016/j.est.2025.116632.
- [26] OLADIPO A A. N, S co - doped biocarbon for supercapacitor application: Effect of electrolytes concentration and modelling with artificial neural network[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2021, 260: 124129. DOI:10.1016/j.matchemphys.2020.124129.
- [27] ABDI J, PIRHOUSHYARAN T, HADAVIMOGHADDAM F, et al. Modeling of capacitance for carbon-based supercapacitors using Super Learner algorithm[J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 66: 107376. DOI:10.1016/j.est.2023.107376.
- [28] ZHANG Y F, TIAN J, HUANG H, et al. New insights into the role of nitrogen doping in microporous carbon on the capacitive charge storage mechanism: From ab initio to machine learning accelerated molecular dynamics[J]. *Carbon*, 2024, 229: 119498. DOI:10.1016/j.carbon.2024.119498.
- [29] RAJ V, NAIR M R, SOAID N I, et al. Benchmarking classical machine learning and neural networks for supercapacitor electrodes optimization[J]. *Diamond and Related Materials*, 2026, 161: 113085. DOI:10.1016/j.diamond.2025.113085.
- [30] REDDY B S, NARAYANA P L, MAURYA A K, et al. Modeling capacitance of carbon-based supercapacitors by artificial neural networks[J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 72: 108537. DOI: 10.1016/j.est.2023.108537.
- [31] TAWFIK W Z, MOHAMMAD S N, RAHOUMA K H, et al. An artificial neural network model for capacitance prediction of porous carbon-based supercapacitor electrodes[J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 73: 108830. DOI: 10.1016/j.est.2023.108830.
- [32] XIE Z H, GADOW S I, FAYZULLAEV K, et al. Feature engineering enhanced machine learning prediction of pore properties in lignin-derived nanoporous carbon for high-performance supercapacitor applications[J]. *ACS Applied Nano Materials*, 2025, 8(38): 18392-18400.
- [33] CHEN Y Y, WANG H, WANG C L, et al. Machine learning-guided prediction of energy storage performance of carbon cathode materials for zinc-ion hybrid capacitors[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2025, 699: 138139. DOI: 10.1016/j.jcis.2025.138139.
- [34] DWIVEDI R P, DUBEY R, MAHAPATRA D K, et al. Ensemble approach assisted specific capacitance prediction for heteroatom-doped high-performance supercapacitors[J]. *International Journal of Energy Research*, 2025, 2025(1): 5975979. DOI: 10.1155/er/5975979.
- [35] KUSHWAHA R, SINGH M K, KRISHNAN S, et al. Machine learning enabled property prediction of carbon-based electrodes for supercapacitors[J]. *Journal of Materials Science*, 2023, 58(39): 15448-15458. DOI:10.1007/s10853-023-08981-8.
- [36] SAAD A G, EMAD-ELDEEN A, TAWFIK W Z, et al. Data-driven machine learning approach for predicting the capacitance of graphene-based supercapacitor electrodes[J]. *Journal of Energy Storage*, 2022, 55: 105411. DOI:10.1016/j.est.2022.105411.
- [37] AHMED S I, RADHAKRISHNAN S, NAIR B B, et al. Efficient hyperparameter-tuned machine learning approach for estimation of supercapacitor performance attributes[J]. *Journal of Physics Communications*, 2021, 5(11): 115011. DOI: 10.1088/2399-6528/ac3574.
- [38] TAWFIK W Z, MOHAMMAD S N, RAHOUMA K H, et al. Machine learning models for capacitance prediction of porous carbon-based supercapacitor electrodes[J]. *Physica Scripta*, 2024, 99(2): 026001. DOI:10.1088/1402-4896/ad190c.
- [39] SUN Y X, SUN P H, JIA J X, et al. Machine learning in clarifying complex relationships: Biochar preparation procedures and capacitance characteristics[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 485: 149975. DOI:10.1016/j.cej.2024.149975.
- [40] KANNAN V, SOMASUNDARAM K, FISHER A, et al. Monte Carlo-based sensitivity analysis of an electrochemical capacitor[J]. *International Journal of Energy Research*, 2021, 45(11): 16947-16962. DOI:10.1002/er.6919.
- [41] PAN R T, GU M Y, WU J Z. Data-driven optimization of carbon electrodes for aqueous supercapacitors[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2024, 69(12): 4320-4334.
- [42] RACCUGLIA P, ELBERT K C, ADLER P D F, et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments[J]. *Nature*, 2016, 533(7601): 73-76. DOI:10.1038/nature17439.
- [43] YUAN X Z, 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. DOI:10.1021/acs.est.3c10922.
- [44] ZHAO C X, LU X Y, TU H Y, et al. Research on specific capacitance prediction of biomass carbon-based supercapacitors based on machine learning[J]. *Journal of Energy Storage*, 2024, 97: 112974. DOI:10.1016/j.est.2024.112974.
- [45] HUSSAIN I, AL MAHMUD A, AMNA R, et al. Interface and surface engineering: The nexus of MXenes, MOFs, and AI in hybrid material design for energy storage/conversion[J]. *Materials Today*, 2025, 89: 344-373. DOI:10.1016/j.mattod.2025.07.026.
- [46] IRFAN M, SHAHI A, BARI M A, et al. Emerging composite electrode architectures based on transition metal oxides for high-performance Li-ion capacitors[J]. *RSC Advances*, 2026, 16(6): 4801-4840.
- [47] LI D P, LIANG A J, ZHOU M W, et al. Energy utilization of agricultural waste: Machine learning prediction and pyrolysis transformation[J]. *Waste Management*, 2024, 175: 235-244. DOI: 10.1016/j.wasman.2024.01.003.
- [48] KATI N, UÇAR F. Investigation of prediction approaches for the design and performance analysis of supercapacitors with

- biomass-based activated carbon electrodes[J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 133: 118029. DOI:10.1016/j.est.2025.118029.
- [49] JAYABAL R. Waste derived graphene metal oxide composites for advanced supercapacitors: A review on modern energy storage [J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 136: 118031. DOI:10.1016/j.est.2025.118031.
- [50] LIU X R, YANG H P, XUE P X, et al. Machine learning modeling of the capacitive performance of N-doped porous biochar electrodes with experimental verification[J]. *Renewable Energy*, 2024, 231: 120969. DOI:10.1016/j.renene.2024.120969.
- [51] ZHAO X L, WANG X Q, GAO P, et al. Eco-friendly synthesis coupled with predictive analytics: Developing hierarchical lignin-derived ordered mesoporous carbon for advanced supercapacitors[J]. *Green Energy & Environment*, 2025, 10(6): 1256-1269. DOI:10.1016/j.gee.2024.11.006.
- [52] SUN Z X, WANG R. Emerging nanomaterials for energy storage: A critical review of metrics, hotspots, and future directions[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2025, 224: 116093. DOI:10.1016/j.rser.2025.116093.
- [53] RAHIMI M, SALAUDEEN S A. Synthesis-feature-coupled machine learning approaches to predict the capacitance of biomass-derived carbon electrodes in supercapacitors[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2026, 348: 131525. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.131525.
- [54] QU L B, WANG P Y, MOTEVALLI B, et al. New engineering science insights into the electrode materials pairing of electrochemical energy storage devices[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(35): 2404232. DOI:10.1002/adma.202404232.
- [55] LU X Y, ZHAO C X, TU H Y, et al. Research on prediction of energy density and power density of biomass carbon-based supercapacitors based on machine learning[J]. *Sustainable Materials and Technologies*, 2025, 44: e01309. DOI: 10.1016/j.susmat.2025.e01309.
- [56] LIU M X, TANG Q, LENG E W, 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. DOI:10.1016/j.cej.2025.172350.
- [57] LIU Y Y, ZHANG H, CAO R, et al. Interpretable machine learning for optimizing the specific capacitance of biomass-derived supercapacitors[J]. *Fuel*, 2026, 417: 138681. DOI: 10.1016/j.fuel.2026.138681.
- [58] 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. DOI:10.1016/j.fuel.2022.125718.
- [59] SOLANGI N H, NEIBER R R, SHARMA B P, et al. Tuning charge storage in bimetallic CoV-LDH for high-performance supercapacitor: A synergistic experimental and machine learning approach[J]. *Small*, 2026, 22(17): e07764. DOI: 10.1002/sml.202507764.
- [60] WICKRAMAARACHCHI K, MINAKSHI M, ASSA ARAVINDH S, et al. Repurposing N-doped grape Marc for the fabrication of supercapacitors with theoretical and machine learning models[J]. *Nanomaterials*, 2022, 12(11): DOI:10.3390/nano12111847.
- [61] KOMARSOFLA M K, KHOSRAVINIA K, KIANI A. Integrated machine learning framework combining electrical cycling and material features for supercapacitor health forecasting[J]. *Batteries*, 2025, 11(7): DOI:10.3390/batteries11070264.
- [62] GHOSH S, SIBI A, PRIYANGA G S, et al. Temperature-dependent performance prediction for cerium oxynitride solid-state symmetric supercapacitor using machine learning[J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 113: 115562. DOI: 10.1016/j.est.2025.115562.
- [63] MIYATA H, MANABE K, SUGAHARA Y, et al. Machine-learning-guided multiscale design of nitrogen-doped carbon for enhanced supercapacitor performance[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2025, 17(36): 50967-50976.
- [64] YUAN F, ZHOU J, YAMAUCHI Y, et al. Supercapacitor dynamics: Mechanisms, architectures, and advanced in-situ characterizations for next-generation energy storage[J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2026, 549: 217268. DOI: 10.1016/j.ccr.2025.217268.
- [65] ZHU S, LI J J, MA L Y, et al. Artificial neural network enabled capacitance prediction for carbon-based supercapacitors[J]. *Materials Letters*, 2018, 233: 294-297. DOI: 10.1016/j.matlet.2018.09.028.
- [66] REHMAN H U, KHAN H, ABBASI Z, et al. DLS-based optimization of ZnS-CoS nanoparticles with enhanced energy and power density for supercapacitor applications and its validation by AI models[J]. *Materials Advances*, 2025, 6(21): 7847-7865.
- [67] SIAL Q A, SAFDER U, IQBAL S, et al. Advancement in supercapacitors for IoT applications by using machine learning: Current trends and future technology[J]. *Sustainability*, 2024, 16(4): DOI:10.3390/su16041516.
- [68] GU R, WEI L, XU N, et al. Machine learning enhanced self-charging power sources[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 35(40): 2505719. DOI:10.1002/adfm.202505719.
- [69] DOUCET T, MOGNIOTTE J F, AMIOT R, et al. Multiphysics measurement method for supercapacitors state of health determination[J]. *Micromachines*, 2025, 16(11): DOI: 10.3390/mi16111295.
- [70] ZHU S, LI J, MA L, et al. Machine learning enabled capacitance prediction for carbon-based supercapacitors [J]. *Materials Letters*, 2018, 233: 294-297. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.09.028>.
- [71] LI Q, ZHENG H, LI C P, et al. Boosting supercapacitor efficiency with δ -MnO₂ nanoflakes on electrochemically exfoliated graphene nanosheets[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2026, 89: 249-258. DOI:10.1016/j.cjche.2025.08.022.
- [72] AHMAD S, ALI KHAN M, EID G, et al. Machine learning-assisted synthesis of N-S functionalized NiO/CoO nanocomposite for enhanced supercapacitor performance[J]. *Electrochimica Acta*,

- 2026, 546: 147782. DOI:10.1016/j.electacta.2025.147782.
- [73] RAMACHANDRAN T, ZHENG L X, BUTT H, et al. Energy nexus: MXene-MOF-chalcogenide hybrids triboelectric nanogenerators (TENGs) for self-powered supercapacitor storage with machine learning insights[J]. *Materials Today Advances*, 2026, 29: 100675. DOI:10.1016/j.mtadv.2025.100675.
- [74] SABET M. Machine learning-optimized hybrid graphene/polymer electrodes for high-performance and scalable supercapacitors[J]. *Journal of Materials Science*, 2025, 60(38): 17738-17756. DOI: 10.1007/s10853-025-11468-3.
- [75] MOMBESHORA E T, MUCHUWENI E, HASHEMI H. Applications of graphene derivatives in all-solid-state supercapacitors[J]. *ChemistrySelect*, 2024, 9(44): e202404345. DOI: 10.1002/slct.202404345.
- [76] DESHSORN K, CHAVALEKVIRAT P, DEEPAISARN S, et al. Historical data mining deep dive into machine learning-aided 2D materials research in electrochemical applications[J]. *ACS Materials Au*, 2026, 6(1): 28-56.
- [77] WANG Z X, WU T Z, ZENG L, et al. Machine learning relationships between nanoporous structures and electrochemical performance in MOF supercapacitors[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(15): 2500943. DOI: 10.1002/adma.202500943.