工业技术

生物炭吸附新兴污染物的机器学习模型预测与机制研究

屈云易[1,2],刘 玲[1,2],冉文悦[1,2],宋潘宇[1,2],武 峥[1,2],洪思奇[1,2*]
(1.纺织印染废水处理及回用陕西省高等学校重点实验室,陕西 西安 710048;
2.西安工程大学环境与化学工程学院,陕西 西安 710048)

摘要:为提升新兴污染物治理效率,研究系统整合549组生物炭吸附实验数据,通过非参数插补方法处理缺失值,采用3种典型算法建立多维度特征生物炭吸附新兴污染物预测模型。其中,XGBoost模型表现出最优拟合性能(测试集 $R^2=0.95$,RMSE=8.32 mg/g)。特征重要性分析结果表明,表面氮官能团与污染物摩尔折射率共同构成吸附协同机制的核心要素,证实表面化学作用在吸附过程中的贡献超过物理作用;平均孔径的重要性显著高于比表面积,且仅当孔径范围与污染物分子尺寸匹配时,微孔填充效应才显著增强。明确表面化学性质在提高新兴污染物吸附量的作用更为关键,为高性能生物炭的定向制备及新兴污染物的高效去除提供了理论支撑。

关键词:机器学习;生物炭;吸附机理;新兴污染物
中图分类号:X52 **文献标志码**:A **文章编号**:0253-4320(2026)11-0202-06
DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.11.033

Machine learning model prediction and mechanism study of biochar adsorption for emerging pollutants

QU Yun-yi[1,2], *LIU Ling*[1,2], *RAN Wen-yue*[1,2], *SONG Pan-yu*[1,2], *WU Zheng*[1,2], *HONG Si-qi*[1,2*]
(1.Key Laboratory of Textile Dyeing Wastewater Treatment of Universities in Shaanxi Province, Xi'an 710048, China;
2.School of Environmental and Chemical Engineering, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China)

Abstract:To enhance the removal efficiency of emerging pollutants (EPs), this study systematically integrated 549 sets of biochar adsorption experimental data. Missing values were addressed using non-parametric imputation methods, and predictive models for biochar-based adsorption of EPs were developed by employing three typical algorithms with multi-dimensional features. Among them, the XGBoost model demonstrated superior fitting performance, achieving a coefficient of determination (R^2) of 0.95 and a root mean square error (RMSE) of 8.32 mg/g on the test set. Feature importance analysis revealed that: surface nitrogen-containing functional groups and the molar refractivity of pollutants constitute the core elements of the synergistic adsorption mechanism, confirming that surface chemical interactions contribute more significantly to the adsorption process than physical interactions; the importance of mean pore size is notably higher than that of the specific surface area, with the micropore-filling effect being markedly enhanced only when the pore size range matches the molecular dimensions of the pollutants. This study clarifies that surface chemical properties play a more critical role in increasing the adsorption capacity of EPs, providing theoretical support for the tailored preparation of high-performance biochar and the efficient removal of emerging pollutants.

Key words: machine learning; biochar; adsorption mechanism; emerging pollutants

随着城市化进程加快,新兴污染物在水环境中的检出频率持续上升,对生态系统和公共健康构成潜在威胁[1]。这类污染物涵盖药物、个人护理品及内分泌干扰物等,而现有常规污水处理技术对其难以有效去除,进入自然水体后形成持久性污染。现有研究表明,部分药物污染物在传统处理工艺中降解效率有限[2],亟需开发高效去除技术。

生物炭作为拥有多孔结构、丰富表面官能团及原料可再生等优势的绿色吸附材料,在新兴污染物治理领域具有巨大潜力。然而,生物炭吸附性能受热解条件、原料特性及改性方法等多因素影响[3],其构效关系尚未完全明晰。传统实验方法如单因素优化法则存在效率低、成本高等局限,而复杂的吸附动力学和等温线模型难以全面描述生物炭对不同污

收稿日期:2025-12-19;**修回日期**:2026-09-04
基金项目:陕西省自然科学基础研究计划(2025JC-YBMS-158)
作者简介:屈云易(1999-),男,硕士,研究方向为基于机器学习的高性能生物炭应用;洪思奇(1986-),女,博士,高级工程师,研究方向为环境催化技术和环境功能材料,通讯联系人,hongsiqi@xpu.edu.cn。

染物的吸附机制,只能在特定条件下解释吸附过程。在此背景下,机器学习技术为揭示生物炭吸附机制提供了新途径。该数据驱动方法能够挖掘生物炭特性、污染物性质与吸附性能间的复杂非线性关系[4-5],从而为材料定向设计与性能预测提供理论支撑[6]。

Ouyang 等[7]的研究详细回顾了生物炭的特性及其去除药物污染物的潜力,并提出需进一步地研究解释吸附机制,评估每个官能团对生物炭表面的影响。最近的研究表明,生物炭吸附药物去除效率很大程度上取决于生物炭的物理化学性质、反应条件和存在的药物类型等因素。这些挑战促进了开发不同算法和数据驱动方法的需求,以了解吸附机制并预测药物去除效率。Zhu 等[8]通过机器学习模型预测了生物炭对各种抗生素的吸附容量,并揭示了比表面积、孔径分布和表面官能团对吸附能力的影响。此外,不同的分子结构也会导致吸附行为的显著差异,例如,分子尺寸较大的污染物往往较难进入生物炭的微孔结构,导致吸附效率降低[9]。

现有研究存在数据特征维度较少、模型精度不足等问题,无法充分解析吸附过程中生物炭特征的全面影响。本研究引入生物炭吸附新兴污染物相关的 26 个特征参数,将机器学习与理论吸附模型相结合,系统分析吸附过程的关键特性。通过建立通用的机器学习优化框架预测生物炭对新兴污染物的最大吸附容量,揭示不同生物炭性质对吸附性能的相对重要性。同时,充分考虑污染物的分子结构和官能团对吸附过程的影响[10]。本研究实现了更全面可靠的模型效果,旨在通过机器学习方法系统解析生物炭吸附新兴污染物的关键影响因素,为高效吸附剂的开发提供新思路。

1　实验方法

1.1　数据收集插补及特征选择

研究数据通过系统性文献检索获取,检索平台为 Web of Science 核心合集,检索策略采用主题词组合:“Biochar”+“Preparation”/“Synthesis”+“Drugs/Pharmaceuticals”+“Adsorption”,时间跨度为 2010—2024 年。数据收集过程中,严格筛选了具有完整参数信息和可靠吸附性能测试结果的研究,确保数据质量和可靠性。从符合筛选标准的 33 篇实验研究论文中提取数据,数据来源于论文中的吸附等温线图表和原始数据表格。使用 GetData Graph Digitizer(v4.8)对图表进行数字化解析共计 549 组数据,其中材料种类包含秸秆、松木、松针、稻壳和竹子等生物质制得的生物炭材料。污染物类型以新型药物为主,见表 1。

表 1　污染物类型

类别	污染物	缩写
磺胺类	磺胺嘧啶	SDZ
	磺胺甲噁唑	SMX
	磺胺甲二唑	SMT
喹诺酮类	环丙沙星	CIP
	司帕沙星	SPD
大环内酯类	螺旋霉素	SPY
其他药物/化学品	甲氧苄啶	TMP
	双氯芬酸	DCF
	萘普生	NPX
	氯喹	CQ
	环磷酰胺	CP
	双酚 A	BIP

基于生物炭吸附新兴污染物的机理,构建了涵盖材料特性、污染物性质及环境条件的多维度特征数据集。根据吸附过程的物理化学机制,将特征变量划分为以下 4 类:①生物炭理化特性,包括碳含量(C)、氢含量(H)、氧含量(O)、氮含量(N)、(O+N)/C 摩尔比、灰分(Ash)、H/C、O/C、N/C 摩尔比、比表面积、微孔体积、总孔体积及平均孔径。②吸附实验条件,包含初始浓度、溶液 pH、离子强度、吸附时间、振荡速率、溶液体积、吸附剂投加量、吸附温度及吸附类型(单一/竞争)。③污染物特性参数,5 项麦高恩线性溶剂化能关系(MLSER)模型特征参数,包括污染物溶解度(Cs)、特征体积(V)、总溶质 H 键酸度(A)、总溶质 H 键碱度(B)、过度的摩尔折射(E)及极性/极化率(S)。这些参数系统描述了污染物的分子特性,有助于揭示吸附过程中的分子间作用机制。④目标变量,实测吸附量(Capacity),作为模型预测的因变量。本研究应用随机森林插补法,对缺失数据进行填补并评估以确保数据可用性。针对数据集中 17 种新兴污染物的复杂命名,研究采用标签编码将其转换为 0~16 的离散数值[11]。在预处理阶段,树模型直接使用原始数值特征;岭回归则采用 Z-score 标准化以消除量纲影响,从而确保系数估计的稳定性[12]。为全面解析各因素对吸附容量的贡献机制,本研究保留全部特征,未进行降维处理。

1.2　机器学习模型建立及评估

为深度解析生物炭对新兴污染物的吸附行为,

本研究采用 3 种典型机器学习算法构建预测框架。集成学习算法方面,选取了随机森林(random forest, RF)与 XGBoost(extreme gradient boosting)。RF 利用装袋法(bagging)降低模型方差,而 XGBoost 则通过梯度提升框架协同正则化技术,两者共同构成了捕捉吸附过程中复杂非线性演变规律的核心工具,能够有效应对生物炭多维特征间的非线性问题[13]。作为对比,本研究引入岭回归(ridge regression)作为线性基准,通过在损失函数中嵌入 L2 正则化项,对特征系数进行收缩,从而在保留物理可解释性的基础上,通过调控正则化参数来抑制模型的过度拟合,其目标函数可表示为:

$$\min\omega \| y - X_\omega \|_2^2 + \alpha \| \omega \|_2^2 \quad (1)$$

式中,α 为正则化参数。

为确保模型的最佳性能,所有模型都将进行超参数优化过程。同时数据集按 8∶2比例随机划分为训练集与测试集,确保模型泛化能力的客观评估。针对模型核心超参数的确定,采用了随机搜索策略,在预设的参数空间内执行了 200 次迭代采样。该过程利用 10 折交叉验证机制,可确定偏差与方差之间的最优平衡点,确保模型在未知数据上的鲁棒性。实验算力支持基于 Python 3.9 环境,核心计算逻辑依托 scikit-learn 1.2、XGBoost 1.7 及 NumPy 1.24 等高性能学术计算库实现。在评估生物炭吸附预测模型性能时,本研究采用决定系数(R^2)和均方根误差(RMSE)核心指标从不同角度全面反映模型的拟合优度与预测精度。均方根误差(RMSE)衡量预测值与真实值之间的平均误差,具有与目标变量相同的量纲(mg/g),值越小表示模型预测越准确。其对大误差更为敏感,能有效反映模型在极端值上的表现。特征分析采用机器学习模型结合排列特征重要性(PFI)方法评估生物炭特征对其吸附性能的影响权重[14]。特征重要性分数 I_j 的计算公式为:

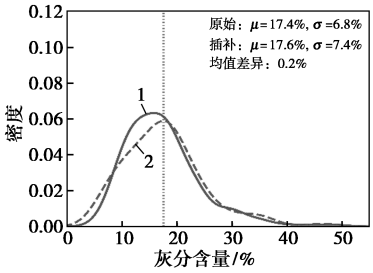
$$I_j = (1/N_T) \sum_T \sum_{t \in T} \Delta Gini(t,j) \quad (2)$$

其中,N_T 为决策树总数;$\Delta Gini(t,j)$ 为特征 j 在节点 t 分裂时引起的基尼不纯度减少量。重要性排序图基于综合评分绘制,并通过 Bootstrap 法(n = 1 000)计算 95%置信区间。稳定性通过交叉验证中变异系数(CV<0.3)验证,确保结果可靠。

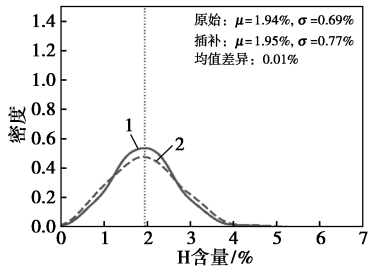
2 结果与讨论

2.1 数据插补评估及特征相关分析

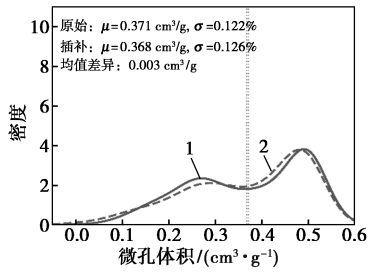
随机森林插补方法在生物炭数据集中的应用效果通过 3 个关键特征的分布对比得以验证。如图 1 所示,灰分含量、H 含量及微孔体积的插补数据与原始数据分布形态高度一致,统计特征保持稳定。灰分含量的均值差异仅为 0.1%,H 含量为 0.01%,微孔体积为 0.001 cm^3/g,标准差变化均控制在合理范围内。分布曲线的重合度表明插补过程未引入明显偏差,有效维持了原始数据的统计特性与分布规律。证实该方法能够准确重构缺失值,保证数据完整性,为后续机器学习建模提供了可靠的数据基础。



(a)灰分含量分布对比



(b)H 含量分布对比



(c)微孔体积分布对比

1—原始数据;2—插补后数据

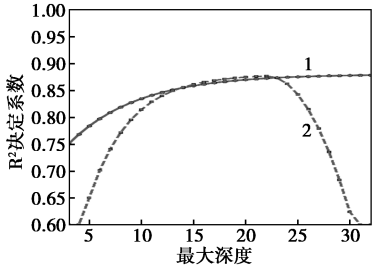
图 1 特征插补分布密度图

通过皮尔逊相关系数矩阵分析发现:比表面积与微孔体积呈显著正相关(r = 0.82,p<0.01),表明生物炭的孔隙结构具有一致性;初始浓度与吸附量呈中度正相关(r = 0.67,p<0.01),符合吸附等温线规律;pH 与氮含量呈弱负相关(r = −0.34,p<0.05),可能反映生物炭氮官能团的质子化效应。尽管存在部分相关性,但正则化方法与树模型的特征选择机制能有效处理此问题,因此保留全部特征用以分析模型解释性能[15]。

2.2 模型预测及机理分析

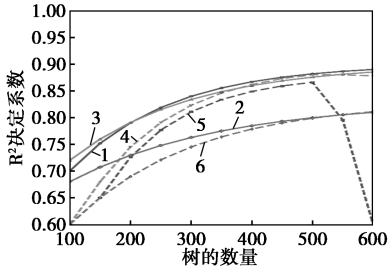
为准确模拟生物炭吸附新兴污染物的非线性过

程,通过超参数优化提升模型整体预测拟合能力。模型初始参数范围基于文献调研与预实验确定,经过 200 次优化迭代,确定模型的最优参数组合。对于随机森林,当最大深度(max_depth)>25 时,验证集 R^2 开始下降而训练集 R^2 持续上升[图 2(a)],表明出现过拟合[图 2(b)];XGBoost 在学习率过低(0.01 以下)且树数量过多(>550)时也表现出类似现象[图 2(c)]。由此后续对 RF 模型限制最大深度,增加分裂节点最小样本数(min_samples_split),适度降低树的数量(n_estimators);对 XGBoost 模型则是提高 gamma 值,增强分裂要求;而岭回归未出现明显过拟合,但存在轻微欠拟合迹象,这与其线性假设的局限性一致。



1—训练集 R^2;2—验证集 R^2

(a)RF 模型最大深度参数优化

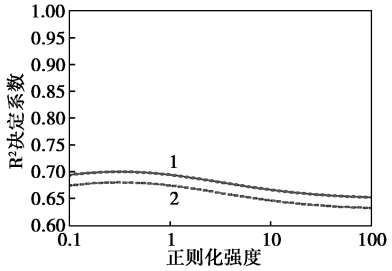


1—训练集 R^2,Ir=0.005;2—验证集 R^2,Ir=0.005;

3—训练集 R^2,Ir=0.05;4—验证集 R^2,Ir=0.05;

5—训练集 R^2,Ir=0.2;6—验证集 R^2,Ir=0.2

(b)岭回归模型正则化强度参数优化



1—训练集 R^2;2—验证集 R^2

(c)XGBoost 模型树的数量参数优化

图 2　模型参数调优图

表 2 为模型最优参数组合,其中随机森林最优树数量(412)显著高于常规默认值(100),表明本研究数据集复杂性较高。XGBoost 模型参数 subsample=0.82 与 colsample_bytree=0.76 则表明适度的数据与特征采样对本研究特别有效。作为线性模型,岭回归主要优化正则化参数 alpha,在 0.1~100 的参数范围内确定最优 alpha=8.74。此值处于中等强度正则化水平,表明数据中存在一定程度的多重共线性,但未达到需要强正则化的程度。

表 2　模型最优参数

模型	参数	范围	最优值
随机森林模型	n_estimators	100~500	412
	max_depth	5~30	23
	min_samples_split	2~15	7
	max_features	0.3~0.9	0.7
XGB 模型	n_estimators	100~600	527
	max_depth	3~12	10
	learning_rate	0.01~0.3	0.068
	subsample	0.6~1.0	0.8

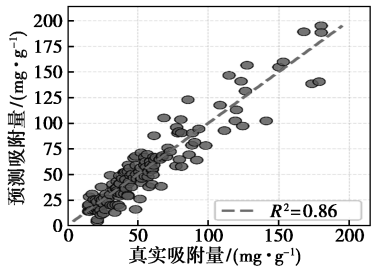
研究采用严格的 8∶2数据划分,并通过 10 折交叉验证确保评估可靠性[16-17]。表 3 展示了 3 种模型在训练集与测试集上的性能指标对比。其中 XGBoost 在测试集上取得最佳性能(R^2=0.95,RMSE=9.2 mg/g),显著优于随机森林(R^2=0.86)和岭回归(R^2=0.68)。此外 3 种模型的训练集与测试集 R^2 差距均较小(≤0.02),表明模型未出现严重过拟合。

表 3　模型效果对比

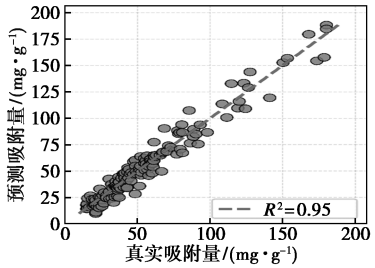
模型	训练集		测试集	
	R^2	RMSE/(mg·g^{-1})	R^2	RMSE/(mg·g^{-1})
XGB 模型	0.96	0.95	8.51	9.22
随机森林模型	0.88	0.86	18.35	19.71
岭回归模型	0.69	0.68	35.27	36.18

图 3 展示了 3 种模型在测试集上的真实值与预测值拟合情况,直观反映了各模型的预测能力。随机森林模型[图 3(a)]表现中等,R^2=0.86,RMSE=19.7 mg/g。其预测点呈扇形分布,低吸附量区域(20~80 mg/g)拟合较好,但高吸附量区域(>100 mg/g)分散明显,表明随机森林在处理极端值时存在一定局限性。XGBoost 模型[图 3(b)]表现出色,预测点紧密围绕 1∶1参考线分布,R^2 达 0.95,RMSE 仅为 9.2 mg/g。在高吸附量区域(>120 mg/g),XGBoost 仍保持良好预测能力,说明其梯度提升机

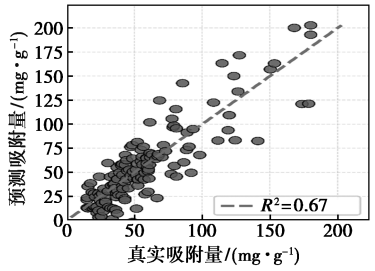
制能有效捕捉复杂非线性关系。岭回归模型[图 3(c)]表现相对较弱，R^2 = 0.68，RMSE = 36.1 mg/g。图中可见明显的系统性偏差，表明线性假设难以捕捉生物炭吸附过程中的复杂非线性机制。



(a) RF 模型预测性能



(b) 岭回归模型预测性能



(c) XGB 模型预测性能

图 3 模型性能预测图

在环境功能材料研究中，预测精度直接影响材料设计与应用效果。基于上述分析，本研究选择 XGBoost 作为最终模型进行后续机理分析，预测精度显著优势。0.95 的 R^2 表明模型能解释 95%的吸附量变异，具有高度实用价值。生物炭吸附过程涉及多种复杂机制(静电作用、π−π 作用、氢键、孔隙填充等)，XGBoost 的梯度提升框架能有效建模这些非线性关系，而岭回归的线性假设明显不足，随机森林的树结构虽能捕捉非线性但表达能力有限。

研究通过机器学习模型解析了生物炭吸附新兴污染物的关键机制。特征重要性分析(图 4)表明，表面化学特性特别是含氮官能团与污染物电子性质共同主导吸附过程，孔隙结构贡献相对有限。既往研究一般强调比表面积的关键作用[18]，而本数据明确显示化学吸附机制在新兴污染物去除中占主导地位，这对传统吸附理论形成重要补充。具体而言，氮含量(N，0.069)和 H/C 比(0.064)在生物炭特征中排序靠前，证实含氮官能团对新兴污染物的特异性吸附贡献显著。这可能源于高氮生物炭表面富集的吡啶氮可与抗生素类污染物形成强配位键，此机制有效解释了磺胺类污染物在高氮改性生物炭上吸附容量提升的现象[19-20]。

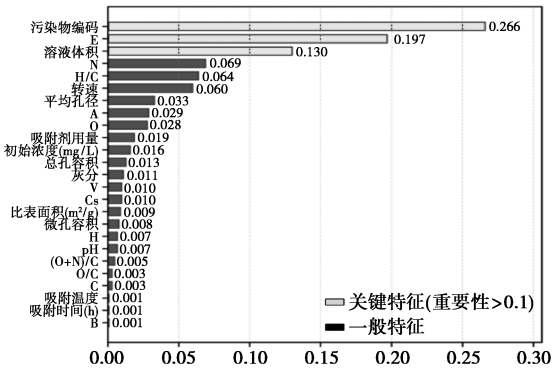


图 4 特征重要性排序图

污染物参数中，摩尔折射率(E = 0.197)的重要性仅次于污染物编码(0.266)，表明分子极性对吸附过程具有关键影响。E 值反映分子电子云变形能力，高 E 值污染物(如三氯生，E = 0.82)易与生物炭芳香结构产生 π−π 电子相互作用[21]。污染物编码的重要性本质上体现了污染物特性与生物炭表面化学的匹配程度，即吸附效果取决于污染物特性与生物炭表面化学的匹配程度而非单一因素。孔隙参数中，平均孔径(0.033)的重要性明显高于比表面积(0.009)，证实孔径分布较总孔体积对新兴污染物吸附更具决定性。当孔径与污染物动力学直径匹配时，微孔填充效应显著增强[18]。值得注意的是，pH(0.007)的重要性较低，这与数据集中 82%的实验在中性条件(pH 6~8)下进行有关，此范围内表面电荷效应相对弱化[22]。

3 结论

本研究基于 549 组生物炭吸附实验数据，创新性地引入 MLSER 污染物参数体系，构建了 3 种包含 29 维特征的机器学习预测模型，其中 XGBoost 模型表现出最优性能(R^2 = 0.95)。对比陈一飞等[23]、花文静等[24]的机器学习辅助生物炭吸附污染物的相关研究，本研究引入了更多特征并且取得了更突出的模拟效果。特征重要性分析揭示以下关键发现：表面化学特性与污染物电子性质共同主导吸附过程，其中氮含量(0.069)与摩尔折射率(0.197)的协

同贡献达到 26.6%,化学吸附机制在吸附新兴污染物中起关键作用。孔隙结构分析显示,平均孔径(0.033)的重要性显著高于比表面积(0.009)。由此仅当孔径范围与污染物分子尺寸匹配时,微孔填充效应才显著增强。

这些发现对生物炭材料设计具有重要指导意义,应摒弃单纯追求高比表面积的传统思路,转而注重表面化学特性与目标污染物性质的匹配。如可通过增强生物炭芳香度(降低 H/C 比)提升生物炭对高摩尔折射率污染物(如卤代酚类)吸附性能。后续研究可结合原位傅里叶变换红外光谱等技术,直接验证氮官能团与污染物间的配位键形成过程,进而从分子层面阐明吸附机制。

参考文献

[1] Gomes I B, Maillard J Y, Simões L C, *et al*. Emerging contaminants affect the microbiome of water systems—strategies for their mitigation[J]. NPJ Clean Water, 2020, 3(1): 39.

[2] Morin-Crini N, Lichtfouse E, Liu G, *et al*. Worldwide cases of water pollution by emerging contaminants: A review[J]. Environmental Chemistry Letters, 2022, 20(4): 2311-2338.

[3] Elkhlifi Z, Iftikhar J, Sarraf M, *et al*. Potential role of biochar on capturing soil nutrients, carbon sequestration and managing environmental challenges: A review[J]. Sustainability, 2023, 15(3): 2527.

[4] Hilal A M, Asiri M M, Al-Otaibi S, *et al*. Nonlinear autoregressive neural network for antimicrobial waste water treatment[J]. Adsorption Science & Technology, 2022: 6292200.

[5] Linardatos P, Papastefanopoulos V, Kotsiantis S. Explainable AI: A review of machine learning interpretability methods[J]. Entropy, 2020, 23(1): 18.

[6] Jaffari Z H, Jeong H, Shin J, *et al*. Machine-learning-based prediction and optimization of emerging contaminants' adsorption capacity on biochar materials[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 466: 143073.

[7] Ouyang J, Zhou L, Liu Z, *et al*. Biomass-derived activated carbons for the removal of pharmaceutical mircopollutants from wastewater: A review[J]. Separation and Purification Technology, 2020, 253: 117536.

[8] Zhu X, Wan Z, Tsang D C W, *et al*. Machine learning for the selection of carbon-based materials for tetracycline and sulfamethoxazole adsorption[J]. Chemical Engineering Journal, 2021, 406: 126782.

[9] Long J, Ren T, Han J, *et al*. Heterostructured $BiFeO_3$@CdS nanofibers with enhanced piezoelectric response for efficient piezocatalytic degradation of organic pollutants[J]. Separation and Purification Technology, 2022, 290: 120861.

[10] Pan M, Liu S, Chew J W. Unlocking the high redox activity of MoS_2 on dual-doped graphene as a superior piezocatalyst[J]. Nano Energy, 2020, 68: 104366.

[11] Chen T, Guestrin C. Xgboost: A scalable tree boosting system[C]. Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining, 2016: 785-794.

[12] de Oliveira J J, da Silva A R, de Torresi S I C, *et al*. It is not the amount of carbon that matters, but how it is structured: The role of pore hierarchy in CO_2 capture[J]. Nature Communications, 2023, 14: 5476.

[13] Lv C, Zhou X, Zhong L, *et al*. Machine learning: An advancedplatform for materials development and state prediction inlithium-ion batteries[J]. Advanced Materials, 2022, 34(25): 2101474.

[14] Casalicchio G, Molnar C, Bischl B. Visualizing the feature importance for black box models[C]. Joint European conference on machine learning and knowledge discovery in databases. Cham: Springer International Publishing, 2018: 655-670.

[15] Myles A J, Feudale R N, Liu Y, *et al*. An introduction to decision tree modeling[J]. Journal of Chemometrics: A Journal of the Chemometrics Society, 2004, 18(6): 275-285.

[16] Putatunda S, Rama K. A comparative analysis of hyperopt as against other approaches for hyper-parameter optimization of XGBoost[C]. Proceedings of the 2018 International Conference on Signal Processing and Machine Learning, 2018: 6-10.

[17] Halkidi M, Vazirgiannis M. Clustering validity assessment: Finding the optimal partitioning of a data set[C]. Proceedings 2001 IEEE international conference on data mining: 187-194.

[18] Dou S, Ke X X, Shao Z D, *et al*. Fish scale-based biochar with defined pore size and ultrahigh specific surface area for highly efficient adsorption of ciprofloxacin[J]. Chemosphere, 2022, 287: 131962.

[19] Guo J, Hu Z, Xie Z, *et al*. Adsorption of tetracycline by nitrogen-enriched biochar prepared at different pyrolysis temperatures: Considering the crucial role of nitrogen configuration[J]. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2024, 179: 106482.

[20] Yu W, Lian F, Cui G, *et al*. N-doping effectively enhances the adsorption capacity of biochar for heavy metal ions from aqueous solution[J]. Chemosphere, 2018, 193: 8-16.

[21] Sun K, Ro K, Guo M, *et al*. Sorption of bisphenol A, 17α-ethinyl estradiol and phenanthrene on thermally and hydrothermally produced biochars[J]. Bioresource Technology, 2011, 102(10): 5757-5763.

[22] Hu B, Ai Y, Jin J, *et al*. Efficient elimination of organic and inorganic pollutants by biochar and biochar-based materials[J]. Biochar, 2020, 2(1): 47-64.

[23] 陈一飞,张晓晴,谭康豪,等.基于机器学习的多孔生物炭吸附 CO_2 性能预测[J].土木与环境工程学报:中英文,2025,47(3):242-250.

[24] 花文静,张彦平,王庆元,等.基于机器学习的生物质炭吸附亚甲基蓝的性能预测[J].环境工程学报,2025,19(10):2550-2562.■