

# 基于机器学习的生物炭高效吸附全氟化合物效能预测

高晋<sup>1</sup>, 王永毅<sup>2</sup>, 陈金毅<sup>1</sup>, 王小凤<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>武汉工程大学化学与环境工程学院, 湖北 武汉

<sup>2</sup>武汉唯沃环境技术有限公司, 湖北 武汉

收稿日期: 2026年3月9日; 录用日期: 2026年4月2日; 发布日期: 2026年4月13日

## 摘要

全氟及多氟烷基化合物(PFASs)因其极强的化学稳定性和生物蓄积性, 已成为当今环境治理的重大挑战。吸附法因高效、低能耗等优势被认为是去除PFASs最具前景的技术之一。生物炭作为一种低成本、可再生的吸附材料, 在PFASs去除领域展现出广阔的应用潜力。然而, 传统生物炭研发模式面临实验成本高、参数关联复杂及非线性机制难量化等瓶颈。机器学习方法凭借其处理高维数据、挖掘复杂非线性关系的能力, 能够从已有实验数据中快速建立“材料性质-吸附性能”的映射关系, 无需进行大量试错实验即可实现性能预测与机制解析, 为突破传统研发模式的局限提供了新途径。本研究利用机器学习技术实现生物炭吸附PFASs效能的精准预测, 从数据库中筛选并整合了258组实验数据, 选取热解温度、(N+O)/C、H/C及比表面积等10种关键理化特征作为输入变量。研究分别采用LR、KNN、SVR和RF四种算法构建模型, 并对其效能进行了评估。特征重要性分析显示, (N+O)/C和H/C是影响最大吸附量的核心驱动因子。据此推测, 极性官能团可能通过极性和氢键与PFASs发生特异性作用, 而高H/C值则暗示疏水作用对吸附的潜在增强效应。相比之下, 比表面积和孔体积的重要性排名靠后, 初步表明在该体系中化学亲和力可能优于物理孔隙填充机制。上述推测仍需结合实验验证或密度泛函理论等理论计算进一步确认。

## 关键词

全氟及多氟烷基化合物, 生物炭, 机器学习, 吸附

# Machine Learning-Based Prediction of the Efficient Adsorption of Perfluorinated Compounds by Biochar

Jin Gao<sup>1</sup>, Yongyi Wang<sup>2</sup>, Jinyi Chen<sup>1</sup>, Xiaofeng Wang<sup>1\*</sup>

\*通讯作者。

文章引用: 高晋, 王永毅, 陈金毅, 王小凤. 基于机器学习的生物炭高效吸附全氟化合物效能预测[J]. 材料科学, 2026, 16(4): 143-154. DOI: 10.12677/ms.2026.164081

<sup>1</sup>School of Chemistry and Environmental Engineering, Wuhan Institute of Technology, Wuhan Hubei

<sup>2</sup>Wuhan Weiwo Environmental Technology Co., Ltd., Wuhan Hubei

Received: March 9, 2026; accepted: April 2, 2026; published: April 13, 2026

## Abstract

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) have emerged as a significant challenge in contemporary environmental remediation due to their exceptional chemical stability and pronounced bioaccumulation potential. Adsorption is widely regarded as one of the most promising approaches for PFAS removal, owing to its high efficiency and low energy consumption. Biochar, as a low-cost and renewable adsorbent material, demonstrates broad application potential in the field of PFASs removal. However, traditional biochar research and development models face bottlenecks including high experimental costs, complex parameter correlations, and difficulties in quantifying non-linear mechanisms. Machine learning methods, with their capacity to process high-dimensional data and capture complex non-linear relationships, can rapidly establish a mapping between material properties and adsorption performance from existing experimental data. This enables performance prediction and mechanistic analysis without extensive trial-and-error experiments, offering a new approach to overcome the limitations of traditional research and development models. In this study, machine learning was employed to enable accurate prediction of PFASs adsorption performance on biochar. A dataset comprising 258 experimental groups was screened and integrated from the literature. Ten key physicochemical features, including pyrolysis temperature, (N + O)/C ratio, H/C ratio, and specific surface area, were selected as input variables. Four algorithms, namely Linear Regression (LR), K-Nearest Neighbors (KNN), Support Vector Regression (SVR), and Random Forest (RF), were implemented and evaluated for their predictive performance. Feature importance analysis revealed that the (N + O)/C and H/C ratios were the predominant factors governing the maximum adsorption capacity. This finding suggests that polar functional groups may facilitate specific interactions with PFASs via hydrogen bonding and electrostatic forces, whereas an elevated H/C ratio implies a potential enhancement of adsorption through hydrophobic interactions. In contrast, specific surface area and pore volume exhibited relatively lower importance, preliminarily indicating that chemical affinity may play a more critical role than physical pore filling in this adsorption system. These proposed mechanisms require further validation through experimental approaches or theoretical calculations such as density functional theory (DFT). Overall, this study not only enables efficient prediction of adsorption performance but also provides a scientific foundation for the rational design of biochar tailored for PFAS remediation.

## Keywords

PFASs, Biochar, Machine Learning, Adsorption

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

全氟及多氟烷基化合物(per-and-polyfluorinated alkyl substances, PFASs)是一类由长短不同的疏水烷基链和亲水官能团所构成的人工合成化合物[1], 其碳氟键稳定性极强, 因而 PFASs 具有非常好的抗酸碱性、

抗氧化还原性、耐高温性,难以被光和生物降解[2]-[6]。同时 PFASs 有良好的疏水、疏油性以及一定的表面活性,因此,PFASs 在生活中有非常广泛的应用,如纺织、皮革、服装防水、食品包装、灭火泡沫等[7]-[9]。PFASs 降解难度大,并且具有远距离迁移性和生物蓄积性等,当在生物体内累计浓度达到一定数值,会对动物和人类产生多种毒害作用[10] [11]。目前去除 PFASs 的主要方法有吸附、氧化、还原以及一些其他物理化学方法(如膜分离、机械分离和等离子体氧化等技术) [12]-[15]。在众多的去除技术中,吸附因其去除效率高、能耗低、操作简便以及吸附剂种类丰富等优势,被认为是去除水体中 PFASs 最具前景且最有效的技术之一。生物炭作为一种低成本和可再生的吸附剂,在全氟化合物的吸附中有较好的表现[16]。生物炭的种类繁多,不同的原材料、煅烧温度等实验条件极大程度影响了生物炭物的理化性质,从而导致其吸附性能产生较大差异[17] [18]。因此,如何寻找到理想的 PFASs 吸附材料是一个巨大的挑战。传统的试错流程(如改变热解温度、升温速率等)需要进行大量的实验,这不仅导致较高的材料与人力成本,而且研发周期较长。PFASs 的吸附过程受生物炭孔隙结构、表面官能团、污染物浓度及 pH 值等多种因素协同影响,传统模型往往难以处理这些参数间的非线性关联。相较于传统的实验分析和模拟等方法,应用机器学习筛选进行 PFASs 吸附材料筛选,是一个不错的方法。机器学习可以利用现有的实验数据,在无需实验的情况下快速预测多种生物炭的吸附性能,极大地缩短了筛选周期,从而降低实验成本。此外,机器学习凭借其在处理高维数据和复杂关联分析方面的潜力,不仅能通过多算法对比实现精准性能预估,还能揭示隐藏的微观结构贡献。从而推动生物炭的研究路径从传统的经验试错型向基于数据的定向设计型模式演进。

在生物炭研发与应用领域,机器学习已展现出多维度的技术优势。冯丁等系统性地论述了机器学习在生物炭吸附重金属中的应用潜力。在污染物去除预测方面, Lu 等对比了六种典型模型对生物炭吸附铜的性能,并给出了最优吸附条件[19]; Zhao 等则利用轻量梯度增强机(Light GBM)与深度神经网络(DNN)建立了  $Pb^{2+}$  和  $Cd^{2+}$  去除率的预测模型,并深入探讨了不同官能团对特定金属离子的吸附贡献[20]。在吸附机理的微观发掘上, Xian 等利用机器学习成功识别出生物炭表面抗生素的吸附位点,揭示了 N-6,  $\pi$ - $\pi$  和 C-O/C-N 等官能团在吸附过程中的核心作用[21]。此外,机器学习的应用已拓展至气体吸附领域,如 Raouf 等针对 KOH 活化生物炭对  $CO_2$  的吸附预测准确率高达 0.9327 [22]。在制备工艺优化方面, Chang 等实现了对废木材基活性炭吸附特性的精准预测与生产流程优化[23]。Li 等进一步提出了基于极端梯度增强算法(XGBoost)与粒子群优化(PSO)的混合框架,通过整合生物炭制备与吸附模型,成功筛选出在  $500^{\circ}C \sim 700^{\circ}C$  下热解的松木高吸附性能生物炭[24],为按需定制高性能生物炭提供了新路径。尽管机器学习在重金属和常规有机污染物领域已取得丰硕成果,但针对 PFASs 这类新型持久性污染物的预测研究仍有待深入。

综上所述,本研究分别采用线性回归(Linear Regression, LR)、K-近邻(K-Nearest Neighbors, KNN)、支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)和随机森林(Random Forest, RF)四种机器学习方法,建立了生物炭对 PFASs 吸附性能的预测模型,并对其预测效能进行了系统评估。同时揭示了生物炭材料的芳香性和极性在吸附过程中的核心地位,为未来开发针对 PFASs 的高性能吸附剂提供了明确方向。

## 2. 材料和方法

### 2.1. 数据收集与分析

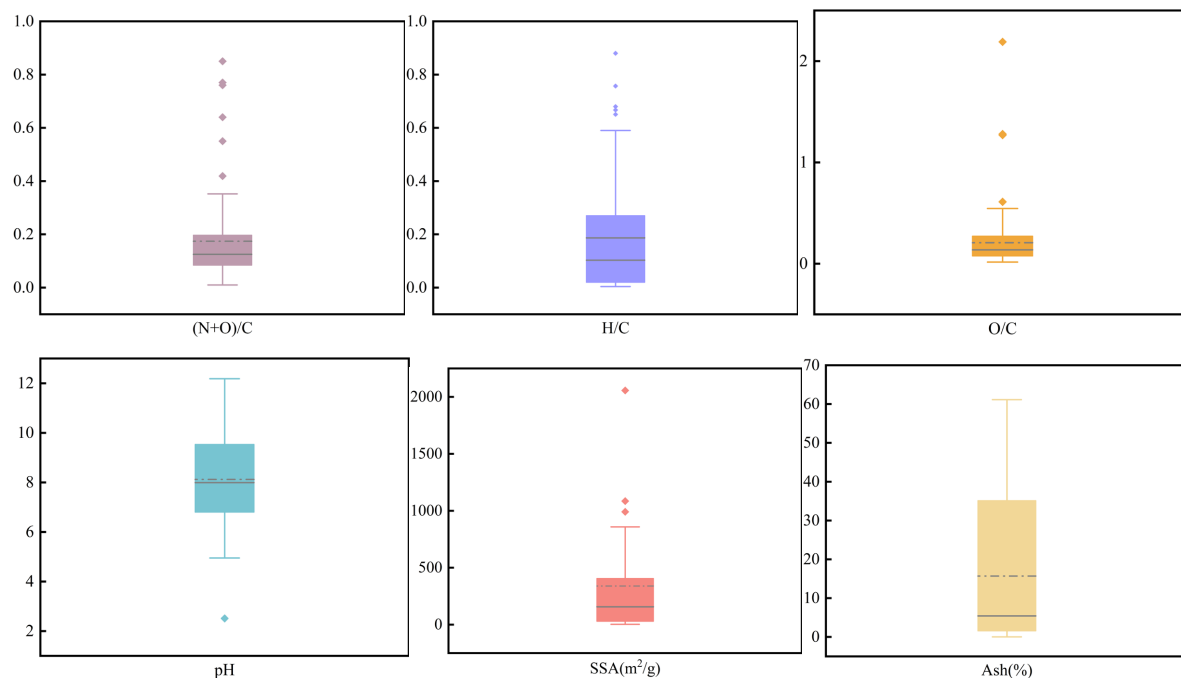
本研究所收集的数据样本来源于 Web of science 和中国知网等数据库,通过检索已经发表的与生物炭吸附 PFASs 相关的论文,记录论文中的最大吸附量数据,在统计数据的过程中,当某一特征数据缺失,则不纳入统计之中。对收集到的数据进行重复值检测后,共计有 258 组数据。数据集包含不同原料类型,

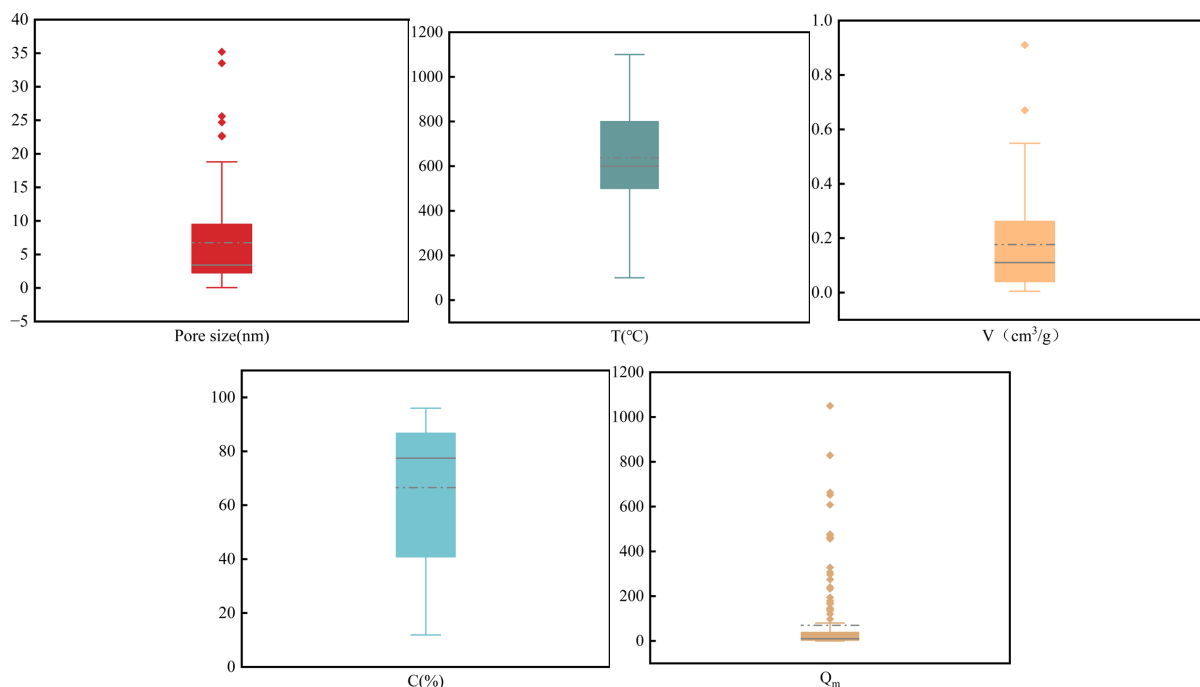
如甘蔗渣、竹子、松木、污泥、家禽粪便、稻草等。污染物主要统计了全氟辛酸(Perfluorooctanoic acid, PFOA)、全氟辛烷磺酸(Perfluorooctane sulphonate, PFOS)、全氟丁酸(Perfluorobutanoic acid, PFBA)、全氟己酸(Perfluorohexanoic acid, PFHxA)以及全氟丁烷磺酸(Perfluorobutane sulfonate, PFBS)等常见 PFASs。原始数据收集过程中选取生物炭的热解温度(T)、碳含量(C)、氢碳的摩尔比(H/C)、氧碳的摩尔比(O/C)、氮和氧对碳的摩尔比((N + O)/C)、灰分(Ash)、比表面积(SSA)、总孔体积(V)、平均孔径(Pore Size)和 pH 值等 10 种特征作为初始特征值。最大吸附量( $Q_m$ )为模型预测目标。

**Table 1.** Statistical characteristics of biochar properties

**表 1.** 生物炭特征数据统计表

特征	最小值	第一个四分位数( $Q_1$ )	中位数	平均值	第三个四分位数( $Q_3$ )	最大值	四分位间距( $Q_3-Q_1$ )
T/ $^{\circ}$ C	100	500	600	637.45	800	1100	300
pH	2.51	6.81	7.99	8.12	9.53	12.18	2.73
C (%)	11.85	40.80	77.47	66.56	86.74	96.00	45.94
Ash	0.03	1.58	5.41	15.69	35.10	61.12	33.52
H/C	0.004	0.020	0.103	0.020	0.270	1.499	0.250
O/C	0.016	0.076	0.137	0.230	0.304	3.669	0.228
(N + O)/C	0.01	0.08	0.13	0.21	0.19	3.73	0.11
SSA ( $m^2/g$ )	2.3	29.7	155.8	338.7	404.1	2056.0	374.4
V ( $cm^3/g$ )	0.005	0.040	0.119	2.670	0.270	126.150	0.230
Pore size (nm)	0.06	2.24	3.42	6.75	9.50	35.20	7.26
$Q_m$ (mg/g)	0	0.90	10.07	69.85	38.60	1050.00	35.70





**Figure 1.** Box plot analysis of PFASs adsorption by biochar

**图 1.** 生物炭对 PFASs 吸附数据的特征箱式图

图 1 为生物炭对 PFASs 吸附量预测数据的特征箱式图，表 1 给出了 11 种特征变量的平均值、最大最小值及四分位数。结合图 1 和表 1 可以看出，样本涵盖了较宽的实验区间，数据覆盖范围广，具有很高的泛化性能。不同的分位数则直观地反映了数据的集中情况，证明了数据的有效性。由于各个参数数值范围不同，采用数据标准化处理，使其服从均值为 0、标准差为 1 的分布。得到符合标准的正态分布函数，以解决各个指标之间的可比性问题。其正态分布函数如式(1)所示：

$$Z_i = \frac{X_i - \rho}{\sigma} \quad (1)$$

式中， $X_i$  为原始数据； $\rho$  为所有样本的均值； $\sigma$  为所有样本的标准差。

## 2.2. 模型选择、优化与数据集划分

为了全面评估不同机器学习算法在预测生物炭吸附 PFASs 效能上的表现，综合考虑模型的复杂性、可解释性以及处理非线性关系的能力，针对以下不同的建模需求，选择了 LR、KNN、SVR 和 RF 这四种模型，构建以  $Q_m$  为预测目标的预测模型。LR 模型可以检验数据集中是否存在显著的线性模式，若 LR 模型在测试集上取得与训练集相近且较高的精度，则表明吸附效能主要受线性因素控制。反之，若 LR 模型表现不佳，则说明生物炭对全氟化合物的吸附过程涉及复杂的非线性机制，从而为选择 SVR 和 RF 等非线性模型提供了强有力的理论依据。KNN 模型基于实例进行学习，不依赖于对数据分布的严格假设，能够通过捕捉邻近样本点的信息来预测生物炭的吸附行为，适用于特征与目标变量关系复杂且难以参数化的情形。SVR 模型能够将输入特征映射到高维空间，有效处理生物炭性质与吸附效能之间的非线性关系，具有较强的泛化能力。RF 作为基于决策树的集成学习算法，RF 通过集成多棵决策树的结果，能够有效处理高维特征，评估各个输入特征的重要性，并在面对复杂数据时表现出优异的鲁棒性和准确性。

使用 Scikit-learn 库中的 train\_test\_split 函数, 将数据划分为训练集(80%)和测试集(20%)。训练集用于模型的训练与超参数调优, 而测试集作为完全未参与建模的独立样本, 仅用于最终评估最优模型的泛化性能。采用网格搜索(GridSearchCV)方法进行模型超参数的优化。该方法通过预设的参数网格, 寻找使模型性能最优的参数组合。在网格搜索过程中, 引入了 5 折交叉验证机制以防止过拟合。

### 2.3. 模型可解释性分析

基于四种算法分别构建最大吸附量预测模型, 并以测试集与训练集上的线性相关系数( $R^2$ )、平均绝对误差(MAE)和均方根误差(RMSE)为评价指标, 筛选出性能最优的预测模型。随后, 采用特征重要性分析, 探究各输入特征对优选模型预测结果的整体贡献; 并结合夏普利值(SHAP)分析与部分依赖图, 进一步从样本层面解释特征变化对模型输出的具体影响。 $R^2$ 、MAE 和 RMSE 的计算公式分别为式(2)~(4):

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

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

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\hat{y}_i - y_i| \quad (4)$$

式中,  $\hat{y}_i$  为预测值;  $y_i$  为数据真实值;  $\bar{y}$  为数据真实值的平均值;  $n$  为样本个数。

### 2.4. 特征相关性分析

本研究采用斯皮尔曼相关系数来评估变量  $X$  (特征值) 与  $Y$  (目标变量) 之间的单调关联程度。作为一种非参数统计方法, 斯皮尔曼相关性通过分析数据的排序而非原始数值来衡量变量间共同变动的趋势[25]。相较于皮尔逊相关系数, 该方法具有更强的鲁棒性: 它不仅不要求变量服从正态分布, 还能有效捕捉变量间单调的变化关系。使用斯皮尔曼相关性公式, 建立斯皮尔曼相关性矩阵见式(5)

$$\rho_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (5)$$

式中,  $x_i$  和  $y_i$  表示  $X$  和  $Y$  的等级化数据,  $\bar{x}$  和  $\bar{y}$  表示等级化后的数据平均值。

## 3. 结果分析

### 3.1. 特征相关性分析

图 2 为生物炭各特征斯皮尔曼相关系数。如图所示, 生物炭特征相关性分析显示, 生物炭的理化性质之间存在显著的内在联系。首先, O/C 与(N + O)/C 表现出极强的正相关( $r = 0.82$ ), 这表明氧含量是决定生物炭表面整体极性的核心因素。与此同时, 碳含量与 Ash 呈显著强负相关( $r = -0.76$ ), 且碳含量与 O/C ( $r = -0.73$ )及(N + O)/C ( $r = -0.69$ )也均表现出较强的负相关性, 反映了生物炭在碳化过程中固定碳增加与含氧官能团减少的典型演变规律。

### 3.2. 模型性能评价

图 3 为四种算法构建的  $Q_m$  吸附量预测模型对测试集和实验集数据的预测效果, 不同模型之间存在较大的差异性。图 3(a)为 LR 模型预测效果, LR 模型的预测效果最差, 其训练集  $R^2$  为 0.41、RMSE 为 96.51, MAE 为 61.29; 测试集  $R^2$  为 0.04、RMSE 为 122.78, MAE 为 69.93。这表明生物炭理化性质与

PFASs 吸附量之间存在显著的非线性关系, 传统的线性模型无法有效捕捉这种复杂的交互机制。相比之下, 非线性模型(KNN, SVR, RF)的预测精度有了部分提升。图 3(b)中 KNN 模型虽然在训练集和测试集上与 RF 模型相比, 表现出较高的拟合度( $R^2$  分别为 0.69、0.54), 但不能作为预测模型使用。图 3(c) SVR 模型训练集  $R^2$  稍有提升, 但测试集的  $R^2$  只有 0.46。显然, 以上三种非集成算法并不适于该预测问题。从图 3(d)中可以看出 RF 模型具有最佳的预测效果, 其训练集  $R^2$  为 0.95、RMSE 为 26.27, MAE 为 14.25; 测试集  $R^2$  为 0.86、RMSE 为 36.71, MAE 为 24.95。综上所述, 基于决策树集成算法的 RF 模型凭借其处理高维非线性数据的优势, 能够最精准地定量描述生物炭特征与 PFASs 吸附容量之间的函数关系。因此, 本研究后续将利用 RF 模型进行特征重要性分析及机制探讨。

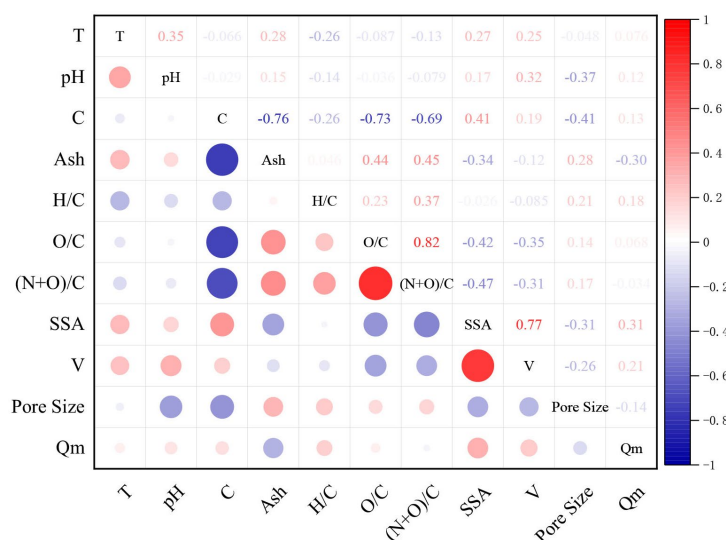


Figure 2. Spearman correlation coefficients between biochar characteristics  
图 2. 生物炭各特征斯皮尔曼相关系数

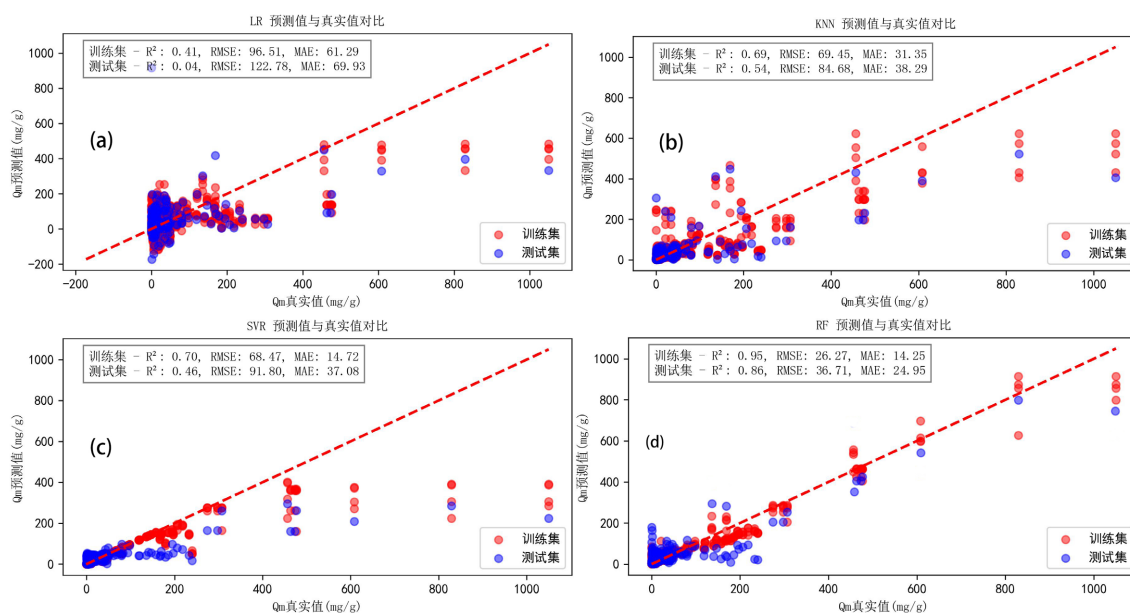


Figure 3. Comparison between predicted and experimental values for the four machine learning algorithms  
图 3. 四种机器学习算法的预测值与真实值对比

### 3.3. 特征重要性分析

为了定量评估 RF 模型各理化性质对最大吸附量  $Q_m$  的贡献程度，对 RF 模型进行特征重要性分析。图 4 揭示了模型在进行  $Q_m$  预测时决策权重的分布情况。结果表明，表面化学特征在模型中具有较高的决策权重。(N + O)/C (贡献率 0.1957) 被识别为最重要的特征，贡献率接近 20%。据此推测，材料表面的极性官能团可能在吸附机制中发挥关键作用。H/C (贡献率 0.1596) 紧随其后，反映出材料的芳构化程度或不饱和度对吸附过程的潜在重要贡献。值得注意的是，尽管在传统认知中 SSA 是吸附的关键，但在本模型中其排名靠后，这初步暗示在该特定体系中，化学交互作用(如氢键或静电引力)的贡献可能超过了简单的物理孔隙填充机制。上述关于吸附机制的推论仍需进一步通过实验验证或理论计算加以证实。其它变量的贡献 pH (0.1099) 和 O/C (0.0933) 表现出中等重要性，体现了表面酸碱性和氧化程度对吸附平衡的调节作用。热解温度(T, 0.0428) 的直接重要性得分较低。这表明温度主要作为一种背景变量，是通过改变材料的内在理化性质间接影响  $Q_m$ ，而非直接的决定因素。T 通常与 H/C、O/C、(N + O)/C 等表面化学参数以及 SSA、Pore Size 等物理结构高度相关。在随机森林模型中，当高度相关的特征同时存在时，模型会分散对共线性变量组的权重，导致单一变量的表观重要性被低估，因而在模型中承担了更低的决策权重。

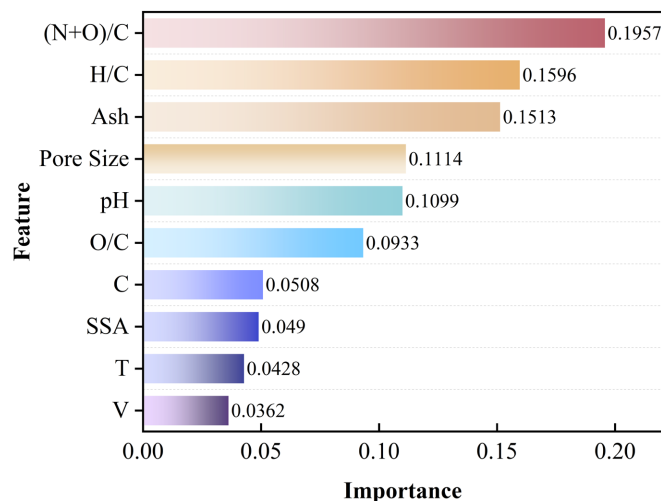


Figure 4. Feature importance of the RF model

图 4. RF 模型特征重要性

### 3.4. 特征 SHAP 值分析

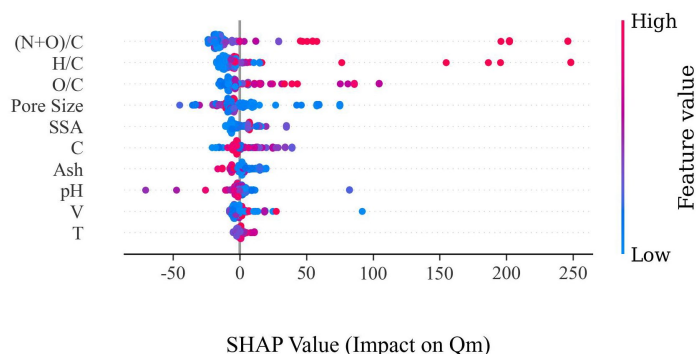


Figure 5. Effects of various features on the predictive model for maximum adsorption capacity

图 5. 各特征对最大吸附量预测模型的影响

通过对模型特征贡献度的深入分析发现,  $(N+O)/C$  与  $H/C$  是决定吸附量  $Q_m$  预测结果的最核心因子。图 5 显示,  $(N+O)/C$  表现出最显著的正向贡献, 高特征值(红点)对应的 SHAP 值最高接近 250, 表明增加生物炭表面的含氮及含氧官能团极大地提升了吸附性能, 这可能归因于增强的氢键或静电相互作用。同时,  $H/C$  的分布规律揭示了材料芳香性对吸附的关键影响。相比之下, Ash 展现了明显的负向效应, 高灰分含量往往导致  $Q_m$  预测值降低。虽然 SSA 与 Pore Size 等物理特征对吸附具有稳定的贡献, 但其影响力相较于化学结构特征显得较为次要, 说明化学改性在提升吸附容量方面具有更大的潜力。

### 3.5. 特征部分依赖性分析

特征依赖性分析能够量化单个或多个输入特征变化时, 模型输出值的响应规律。通过部分依赖图, 可以直观展示特征在取值范围内对预测结果的边际影响。图 6 结果表明, 对于 PFASs 的吸附而言, 生物炭的化学改性比单纯追求高比表面积更具实际价值。

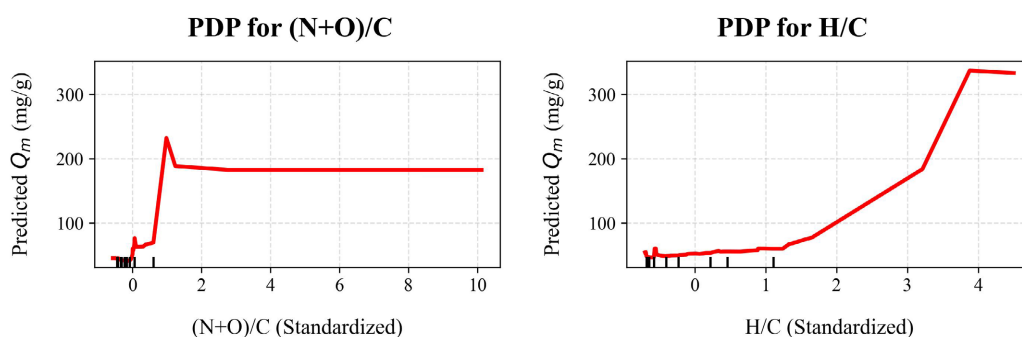


Figure 6. Partial dependence plots of  $(N+O)/C$  and  $H/C$  on  $Q_m$

图 6.  $(N+O)/C$  和  $H/C$  对  $Q_m$  的部分依赖关系图

在所有特征中,  $(N+O)/C$  对预测吸附量  $Q_m$  的正向影响最为显著。部分依赖图显示, 当其标准化数值从 0 增加到 1 左右时, 预测的  $Q_m$  呈现出阶梯式的上升趋势。这表明极性官能团的引入是提升吸附性能的阈值因子, 一旦超过特定含量, 生物炭与污染物之间的氢键或静电吸引力将发生质变。这与 SHAP 分析中该特征排名第一的重要性相一致。而  $H/C$  比例反映了生物炭的芳香化程度及其疏水性。部分依赖图揭示了其对  $Q_m$  的复杂影响: 在较低范围内, 影响相对平缓; 但当  $H/C$  的标准化数值超过 2 时, 预测吸附量再次显著增加。这暗示了在特定的表面结构下, 疏水作用对吸附过程起到了关键的增强作用。

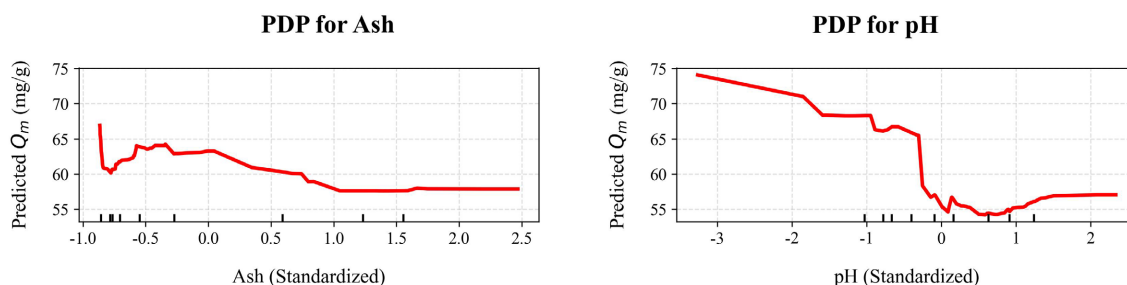


Figure 7. Partial dependence plots of Ash and pH on  $Q_m$

图 7. Ash 和 pH 对  $Q_m$  的部分依赖关系图

如图 7 所示, 与化学特征的正向拉动不同, Ash 的部分依赖图通常呈现平稳或略微下降的趋势。结

合 SHAP 汇总分布图, 这验证了灰分对吸附具有抑制作用。高灰分含量可能通过阻塞孔道或掩盖活性位点, 削弱了生物炭对污染物的捕获能力。而 pH 的影响在部分依赖图中表现出一定的波动性, 且其 SHAP 重要性排名相对靠后。这说明 pH 更多是作为一个调节因子而非主导驱动力。在特定区间内, pH 的改变会影响表面电荷分布, 进而对吸附量产生非线性扰动。

#### 4. 讨论

本研究基于机器学习方法构建了生物炭对 PFASs 吸附性能的预测模型, 系统评估了四种算法的预测效能, 并结合特征重要性分析、SHAP 值分析和部分依赖图, 深入探讨了各理化性质对吸附容量的影响机制。

四种机器学习模型中, RF 模型在训练集和测试集上均表现出最优的预测性能。生物炭对 PFASs 的吸附受多种理化特征共同驱动, 相关性分析显示, 虽然 SSA 与  $Q_m$  存在一定的线性相关性( $r = 0.31$ ), 但大多数特征(如 pH、T、Pore Size)与  $Q_m$  的直接线性相关性极弱。LR 模型的失效( $R^2 = 0.04$ )验证了这种高度非线性的映射关系。RF 模型通过构建多层决策树, 能够自动识别并模拟特征间的非线性交互, 从而实现了复杂吸附过程的精准刻画。特征重要性分析表明, 吸附容量并非由单一因素决定, 而是受(N+O)/C、H/C 及 O/C 等多个特征的共同调控。RF 模型在每次分裂节点时都会随机选择特征子集, 这种集成学习机制有效地平衡了不同理化参数对预测结果的贡献度。特别是对于排名第一的关键特征(N+O)/C, RF 模型能够灵敏地捕捉其微小变化对  $Q_m$  的影响, 而不会被其他弱相关特征干扰。

特征重要性分析显示, (N+O)/C、H/C 和灰分含量是影响 RF 模型预测结果的前三大特征, 表明化学性质在 PFASs 吸附过程中占据主导地位。(N+O)/C 反映了生物炭表面含氮和含氧极性官能团的丰度, 其重要性最高, 说明极性官能团通过氢键、静电吸引或配位作用与 PFASs 分子中的极性基团(如羧基、磺酸基)发生特异性相互作用, 显著提升吸附容量, 这与 Wu 等的分析一致[26]。SHAP 分析进一步证实, 高(N+O)/C 值对  $Q_m$  呈现稳定的正向贡献, 部分依赖图也显示其与吸附量呈阶梯式上升关系, 表明极性官能团的引入是提升吸附性能的关键因素。H/C 的重要性位列第二。SHAP 分析表明, 高 H/C 值对吸附产生正向贡献, 这与部分依赖图结果一致: 当 H/C 标准化值超过 2 时, 预测吸附量显著增加。这暗示了在特定的表面结构下, 疏水作用可能对吸附过程起到了关键的增强作用, 验证了 Guo 和 Wang 等的结论[27][28]。值得注意的是, 本研究中 SSA 和总孔体积 V 的重要性排名靠后(分别为 0.0490 和 0.0362), 远低于化学特征。这表明在 PFASs 吸附体系中, 化学特异性相互作用的贡献超过了物理孔隙填充机制, 单纯追求高比表面积并不能有效提升吸附性能。

基于上述特征重要性分析结果, (N+O)/C 被识别为影响吸附性能的最关键特征, 这为高性能生物炭的定向改性提供了明确方向。具体而言, 可通过以下策略提升生物炭表面的极性官能团丰度: (1) 氮掺杂改性, 如以尿素、氨水或三聚氰胺为氮源, 通过浸渍-热解或化学气相沉积等方法将含氮官能团(如吡啶氮、吡咯氮、季铵氮)引入生物炭骨架, 增强其对 PFASs 的静电吸引和氢键作用; (2) 氧化改性, 采用硝酸、过氧化氢或臭氧等氧化剂处理生物炭, 增加羧基、羟基、内酯基等含氧官能团的密度, 从而提升材料与 PFASs 极性头基之间的特异性相互作用。

尽管本研究构建的 RF 模型取得了较好的预测效果, 但仍存在一定局限性。首先, 数据样本量相对有限, 可能影响模型的泛化能力, 未来可通过扩充数据集、纳入更多原料类型和吸附条件进一步提升模型稳健性。其次, 本研究未将 PFASs 分子结构特征(如碳链长度、官能团类型)纳入输入变量, 限制了模型对吸附机理的深入解析。未来可结合分子描述与机器学习方法, 构建多尺度预测模型, 实现从材料性质到分子结构的全面表征。最后, 未来会将优选模型与实验验证相结合, 开展针对特定 PFASs 污染物的生物炭定向设计与吸附性能优化研究, 为实际污染治理提供理论指导。

## 5. 结论

采用 LR、KNN、SVR、RF 四种机器学习模型对生物炭吸附 PFASs 的性能进行了预测，将四种模型的精度和稳定性进行了对比分析得出以下结论：

(1) 在四种机器学习模型中，随机森林(RF)算法对生物炭吸附全氟化合物(PFASs)的最大吸附量  $Q_m$  具有最优的预测性能，测试集决定系数  $R^2$  达到 0.86，均方根误差 RMSE 为 26.19，平均绝对误差 MAE 为 24.45，显著优于 LR、KNN、SVR 等模型，表明集成树模型能够有效捕捉生物炭理化性质与 PFASs 吸附行为之间的非线性关系，适用于此类复杂体系的性能预测。

(2) 特征重要性分析表明，表面化学性质是模型预测生物炭吸附 PFASs 性能的核心因素。其中，(N + O)/C 贡献率最高(0.1957)，H/C 次之(0.1596)，而 SSA 和 V 的贡献相对较低(分别为 0.0490 和 0.0362)。这一结果初步揭示了在 PFASs 吸附过程中，化学吸附可能起到比物理孔隙填充更为重要的作用，后续可通过实验与理论计算相结合的方式对这一机制假设进行验证。

(3) SHAP 值分析与部分依赖图进一步验证了关键特征的影响规律：(N + O)/C 对吸附量呈现显著的正向阶梯式促进效应，表明极性官能团的引入是提升吸附性能的关键因素；H/C 与吸附量的正相关性表明，可以通过增强疏水分配作用提升对 PFASs 的吸附能力；高灰分则可能通过堵塞孔道或掩盖活性位点降低吸附容量。基于此，建议在生物炭设计与改性中优先考虑增强表面极性官能团丰度。具体改性策略可包括：氮掺杂改性、氧化改性等。氮掺杂改性：如采用尿素、氨水或三聚氰胺等氮源对生物炭进行后处理或共热解，引入含氮官能团以增强静电与氢键作用；氧化改性：如利用硝酸、过氧化氢或臭氧处理，增加羧基、羟基等含氧官能团的密度。上述方法有望在现有吸附性能基础上进一步提升，其实际效果取决于改性条件与 PFASs 分子结构的匹配程度，建议后续结合实验与理论计算加以验证与优化。

## 基金项目

武汉市卫生健康科研基金资助(项目号 WY22A03)。

## 参考文献

- [1] Podder, A., Sadmani, A.H.M.A., Reinhart, D., Chang, N. and Goel, R. (2021) Per and Poly-Fluoroalkyl Substances (PFAS) as a Contaminant of Emerging Concern in Surface Water: A Transboundary Review of Their Occurrences and Toxicity Effects. *Journal of Hazardous Materials*, **419**, Article ID: 126361. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.126361>
- [2] Lenka, S.P., Kah, M. and Padhye, L.P. (2021) A Review of the Occurrence, Transformation, and Removal of Poly- and Perfluoroalkyl Substances (PFAS) in Wastewater Treatment Plants. *Water Research*, **199**, Article ID: 117187. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117187>
- [3] Ghisi, R., Vamerali, T. and Manzetti, S. (2019) Accumulation of Perfluorinated Alkyl Substances (PFAS) in Agricultural Plants: A Review. *Environmental Research*, **169**, 326-341. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2018.10.023>
- [4] Rahman, M.F., Peldszus, S. and Anderson, W.B. (2014) Behaviour and Fate of Perfluoroalkyl and Polyfluoroalkyl Substances (pfass) in Drinking Water Treatment: A Review. *Water Research*, **50**, 318-340. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.10.045>
- [5] Ateia, M., Maroli, A., Tharayil, N. and Karanfil, T. (2019) The Overlooked Short- and Ultrashort-Chain Poly- and Perfluorinated Substances: A Review. *Chemosphere*, **220**, 866-882. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.12.186>
- [6] Li, T., Chen, Y., Wang, Y., Tan, Y., Jiang, C., Yang, Y., et al. (2024) Occurrence, Source Apportionment and Risk Assessment of Perfluorinated Compounds in Sediments from the Longest River in Asia. *Journal of Hazardous Materials*, **467**, Article ID: 133608. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.133608>
- [7] Kotthoff, M., Müller, J., Jüriling, H., Schlummer, M. and Fiedler, D. (2015) Perfluoroalkyl and Polyfluoroalkyl Substances in Consumer Products. *Environmental Science and Pollution Research*, **22**, 14546-14559. <https://doi.org/10.1007/s11356-015-4202-7>
- [8] Lindstrom, A.B., Strynar, M.J. and Libelo, E.L. (2011) Polyfluorinated Compounds: Past, Present, and Future. *Environmental Science & Technology*, **45**, 7954-7961. <https://doi.org/10.1021/es2011622>

- [9] Liu, J., Cui, X., Tan, Y., Dong, P., Ou, Y., Li, Q., *et al.* (2022) Per- and Perfluoroalkyl Substances Alternatives, Mixtures and Liver Function in Adults: A Community-Based Population Study in China. *Environment International*, **163**, Article ID: 107179. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2022.107179>
- [10] Liang, L., Pan, Y., Bin, L., Liu, Y., Huang, W., Li, R., *et al.* (2022) Immunotoxicity Mechanisms of Perfluorinated Compounds PFOA and PFOS. *Chemosphere*, **291**, Article ID: 132892. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132892>
- [11] Sadia, M., Nollen, I., Helmus, R., ter Laak, T.L., Béen, F., Praetorius, A., *et al.* (2023) Occurrence, Fate, and Related Health Risks of PFAS in Raw and Produced Drinking Water. *Environmental Science & Technology*, **57**, 3062-3074. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c06015>
- [12] Leung, S.C.E., Shukla, P., Chen, D., Eftekhari, E., An, H., Zare, F., *et al.* (2022) Emerging Technologies for PFOS/PFOA Degradation and Removal: A Review. *Science of the Total Environment*, **827**, Article ID: 153669. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.153669>
- [13] Kucharzyk, K.H., Darlington, R., Benotti, M., Deeb, R. and Hawley, E. (2017) Novel Treatment Technologies for PFAS Compounds: A Critical Review. *Journal of Environmental Management*, **204**, 757-764. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2017.08.016>
- [14] Alalm, M.G. (2022) Mechanisms and Pathways of PFAS Degradation by Advanced Oxidation and Reduction Processes: A Critical Review. *Chemical Engineering Journal*, **450**, Article ID: 138352.
- [15] Du, Z., Deng, S., Bei, Y., Huang, Q., Wang, B., Huang, J., *et al.* (2014) Adsorption Behavior and Mechanism of Perfluorinated Compounds on Various Adsorbents—A Review. *Journal of Hazardous Materials*, **274**, 443-454. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2014.04.038>
- [16] Liang, D., Li, C., Chen, H., Sørmo, E., Cornelissen, G., Gao, Y., *et al.* (2024) A Critical Review of Biochar for the Remediation of PFAS-Contaminated Soil and Water. *Science of the Total Environment*, **951**, Article ID: 174962. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.174962>
- [17] Zhang, H., Chen, C., Gray, E.M. and Boyd, S.E. (2017) Effect of Feedstock and Pyrolysis Temperature on Properties of Biochar Governing End Use Efficacy. *Biomass and Bioenergy*, **105**, 136-146. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2017.06.024>
- [18] Xu, D., Cao, J., Li, Y., Howard, A. and Yu, K. (2019) Effect of Pyrolysis Temperature on Characteristics of Biochars Derived from Different Feedstocks: A Case Study on Ammonium Adsorption Capacity. *Waste Management*, **87**, 652-660. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2019.02.049>
- [19] Lu, H., Li, P., Huang, Y., Liu, F., Gao, B., Yang, J., *et al.* (2025) Predicting the Cu Adsorption Performance of Original Biochar in Aquatic Environments via Interpretable Machine Learning Models. *Journal of Water Process Engineering*, **75**, Article ID: 108079. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2025.108079>
- [20] Zhao, C., Yue, W., Jiang, Z., Lu, X., Xia, Q., Shen, Z., *et al.* (2025) Predictive Modeling of Heavy Metal Lead and Cadmium Adsorption on Biochar Based on Machine Learning. *International Journal of Phytoremediation*, **28**, 748-755. <https://doi.org/10.1080/15226514.2025.2581819>
- [21] Xian, B., Li, Q., Zhao, H. and Gong, Q. (2025) Exploring the Adsorption Sites and Mechanism of Biochar towards Tetracycline Using Machine Learning. *Journal of Water Process Engineering*, **75**, Article ID: 107970. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2025.107970>
- [22] Hassan, R. and Baghban, A. (2025) Predicting CO<sub>2</sub> Adsorption in Koh-Activated Biochar Using Advanced Machine Learning Techniques. *Scientific Reports*, **15**, Article No. 24410. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-09248-9>
- [23] Chang, J. and Lee, J. (2024) Machine Learning-Based Prediction of the Adsorption Characteristics of Biochar from Waste Wood by Chemical Activation. *Materials*, **17**, Article No. 5359. <https://doi.org/10.3390/ma17215359>
- [24] Li, J., Pan, L., Huang, Y., Liu, X., Ye, Z. and Wang, Y. (2024) Biochar Design for Antibiotics Adsorption via a Hybrid Machine-Learning-Based Optimization Framework. *Separation and Purification Technology*, **348**, Article ID: 127666. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.127666>
- [25] Xiao, C., Ye, J., Esteves, R.M. and Rong, C.M. (2016) Using Spearman's Correlation Coefficients for Exploratory Data Analysis on Big Dataset. *Concurrency and Computation-Practice and Experience*, **28**, 3866-3878. <https://doi.org/10.1002/cpe.3745>
- [26] Wu, Y., Qi, L. and Chen, G. (2022) A Mechanical Investigation of Perfluorooctane Acid Adsorption by Engineered Biochar. *Journal of Cleaner Production*, **340**, Article ID: 130742. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.130742>
- [27] Guo, W., Huo, S., Feng, J. and Lu, X. (2017) Adsorption of Perfluorooctane Sulfonate (PFOS) on Corn Straw-Derived Biochar Prepared at Different Pyrolytic Temperatures. **78**, 265-271. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2017.06.013>
- [28] Wang, Z., Alinezhad, A., Nason, S., Xiao, F. and Pignatello, J.J. (2023) Enhancement of Per- and Polyfluoroalkyl Substances Removal from Water by Pyrogenic Carbons: Tailoring Carbon Surface Chemistry and Pore Properties. *Water Research*, **229**, Article ID: 119467. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.119467>