

机器学习驱动有机固废厌氧发酵产乳酸预测

郭雪强¹, 陶 雪², 刘士奇¹, 张光明^{1,*}

(1. 河北工业大学 能源与环境工程学院, 天津 300401;

2. 茅台学院 资源与环境学院, 贵州 仁怀 564500)

摘要: 有机固废(OSW)通过厌氧发酵生产乳酸是实现资源高值化利用的重要途径。针对传统经验调控方法难以精确刻画多因素耦合作用,且存在发酵周期较长、参数设计不合理及性能不稳定等问题,本研究采用可解释因果机器学习(ICML)框架,对OSW厌氧发酵产乳酸过程进行系统评估。通过对比不同模型,梯度提升决策树(XGBoost、XGB)在预测乳酸浓度、产率及生产速率方面表现最优。Shapley 加性解释(SHAP)分析表明,水力停留时间(HRT)、总固体(TS)、挥发性固体(VS)和有机负荷(OLR)是影响乳酸性能的关键因素。LiNGAM模型进一步揭示变量间的因果路径:水力保留时间(HRT)对乳酸产率具有显著的直接效应,而OLR是提升生产速率的核心正向驱动因子;同时,底物类型与接种比能通过直接或间接路径调控发酵过程。偏依赖分析(PDP)明确了最优工艺区间:在VS>50 g/L、TS为200~250 g/L、HRT为2.5~5.0 d且OLR<18 g VS/(L·d)时,乳酸浓度可达20 g/L以上;在HRT为10~15 d、TS<25 g/L、OLR<10 g VS/(L·d)且温度为30~45 °C时,乳酸产率达0.30 g/g VS以上;在有机负荷>30 g VS/(L·d)、HRT<3 d、VS>100 g/L、TS>130 g/L时,乳酸生产速率可达7 g/(L·d)以上。此外,二维偏依赖分析(2D-PDP)识别了HRT与TS的交互作用及其对性能平衡的适宜窗口。研究表明,ICML方法能有效揭示工艺参数与乳酸性能间的非线性因果关系,为OSW厌氧发酵的工艺优化与实验设计提供定量指导,助力有机废弃物资源化技术发展。

关键词: 机器学习; 有机固废; 厌氧发酵; 乳酸生产; 参数优化

中图分类号: X705

文献标识码: A

Machine Learning-Driven Prediction of Lactic Acid Production from Anaerobic Fermentation of Organic Solid Waste

GUO Xueqiang¹, TAO Xue², LIU Shiqi¹, ZHANG Guangming^{1,*}

(1. School of Energy & Environmental Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China;

2. Department of Resources and Environment, Moutai Institute, Renhuai 564500, China)

Abstract: Anaerobic fermentation of organic solid waste (OSW) for lactic acid production represents an effective pathway for high-value resource recovery. However, conventional experience-based parameter regulation methods are limited in their ability to accurately characterize the coupled effects of multiple operational factors, often leading to extended fermentation periods, suboptimal parameter design, and unstable performance. To identify key control variables and quantitatively optimize process conditions, an interpretable causal machine learning (ICML) framework was applied to evaluate lactic acid production during the anaerobic fermentation of OSW. Three machine learning models—random forest (RF), gradient boosting regression (GBR), and gradient boosting decision tree (XGBoost,

收稿日期: 2026-01-26

修回日期: 2026-02-14

接受日期: 2026-02-28

DOI: 10.20078/j.eep.20260310

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52360020)

第一作者: 郭雪强(2001—), 男, 河北石家庄人, 硕士研究生, 主要研究方向为水处理与资源化。E-mail: 202431304022@stu.hebut.edu.cn

*通讯作者: 张光明(1973—), 女, 湖南永州人, 教授, 主要研究方向为水污染控制与资源化、生物质处理与资源化技术。

E-mail: 2020017@hebut.edu.cn

XGB)—were systematically compared. The XGB model exhibited superior predictive performance in estimating lactic acid concentration, yield, and production rate. Based on the optimized XGB model, Shapley additive explanations (SHAP) were employed to quantify the relative importance of input variables. Hydraulic retention time (HRT), total solids (TS), volatile solids (VS), and organic loading rate (OLR) were identified as key factors influencing lactic acid production performance. To further elucidate causal relationships, the linear non-Gaussian acyclic model (LiNGAM) was used to distinguish direct and indirect causal effects between features and target variables. The results indicated that HRT exerted a significant direct effect on lactic acid yield, while OLR was the primary positive driver of the production rate. Additionally, substrate type and inoculum ratio regulated the process through direct or indirect pathways. Partial dependence plots (PDPs) were subsequently applied to determine optimal parameter ranges. Lactic acid concentration exceeds 20 g/L when VS > 50 g/L, TS is 200–250 g/L, HRT is 2.5–5.0 d, and OLR < 18 g VS/(L·d); lactic acid yield peaks above 0.30 g/g VS when HRT is 10–15 d, TS < 25 g/L, OLR < 10 g VS/(L·d), and temperature is 30–45 °C; and lactic acid production rate exceeds 7 g/(L·d) when organic loading rate > 30 g VS/(L·d), hydraulic retention time < 3 d, VS > 100 g/L, and TS > 130 g/L. Two-dimensional partial dependence analysis (2D-PDP) further demonstrated the interactive effects of HRT and TS, defining suitable operating windows for balancing concentration and production rate. These findings demonstrate that the ICML approach can effectively elucidate the nonlinear relationships between process parameters and lactic acid production performance, offering quantitative guidance for parameter optimization and experimental design in OSW-based lactic acid production, thereby contributing to the advancement of organic waste resource recovery.

Keywords: Machine learning; Organic solid waste; Anaerobic fermentation; Lactic acid production; Parameter optimization

0 引 言

乳酸作为一种重要的化工原料,在医疗、化工、食品^[1-2]及环保等领域具有广泛应用,市场需求大、经济价值高。乳酸的工业化生产包括化学合成法和生物发酵法等^[3-5]。其中,生物发酵法条件温和、环境友好、发酵效率高^[6-7],是乳酸工业化生产主要途径。该方法通常以富含淀粉的甘薯、玉米、大米等为原料^[8-9],经水解生成葡萄糖^[10]、麦芽糖等糖类作为碳源,并利用乳酸菌或真菌等微生物进行发酵制取乳酸^[11]。该过程中底物成本约占总成本的30%~70%^[12]。为了降低生产成本,许多廉价的有机固体废弃物(工农业废物和食品废物等)被应用于乳酸发酵^[13]。乳酸菌在生长代谢及产酸过程中需依赖外部摄取多种营养物质,包括碳源、氮源等^[14]。此外,发酵条件如培养温度、pH等因素也对乳酸发酵效率具有重要影响^[15]。为提高乳酸产量并进一步控制发酵成本,目前大量研究聚焦于乳酸发酵工艺的优化^[16-19],旨在通过调控关键参数实现过程强化与成本效益提升。

厌氧发酵中乳酸的生产涉及复杂的操作参数与非线性参数、多个相互关联的反应过程,以及高度可变的发酵微生物群。传统调整参数方法通常缺乏精确度,导致发酵时间较长且结果不稳定。机器学习能够突破人类感知的限制,处理多维空间中的复杂问题,从而能够发现被忽视的潜在关系^[20]。近年来,机器学习在评估有机废弃物发酵方面取得了显著进展。LONG等使用随机森林(RF)、XGB和人工神经网络模型识别关键微生物和操作参数^[21],并应用遗传算法(GA)和粒子群优化(PSO)等优化算法预测适宜工艺条件,为食物废弃物转化为链脂肪酸提供了关键指导^[22]。在复杂的厌氧共消化系统中,DE CLERCQ展示了XGB模型在大规模数据集上的强大预测能力^[23],MA等使用XGB模型预测了己酸的生产性能和工艺参数优化^[24]。这些研究表明机器学习在有机废弃物发酵方面有良好的预测能力。

本文采用机器学习方法,研究了有机废弃物厌氧发酵中乳酸的生产情况。将乳酸浓度、乳酸产率和乳酸生产速率作为目标变量。首先,确定

这些目标变量的最优模型,并确定影响每个目标变量的驱动因素。其次,确定影响不同目标变量的因素,揭示多个特征变量与各个目标变量之间的因果关系。此外,还探讨了主要影响因素对乳酸产生的单独及联合影响,提出不同需求下最有助于乳酸生产的工艺参数。研究结果将有助于理解有机废弃物厌氧发酵驱动因素对乳酸生产的影响,并推动乳酸生产工艺参数的改进。

1 材料和方法

1.1 数据收集与预处理

本研究基于 Web of Science 和 CNKI 数据库收集了 2016—2025 年有关有机废弃物厌氧发酵产乳酸的文献数据,涵盖了不同的发酵底物(餐厨垃圾、猪粪、苹果、酒糟、土豆、香菇菌糠和苦参药渣)和接种物(乳酸菌、蒙氏肠球菌、植物乳杆菌、甜酒曲、泡菜粉和鼠李糖乳杆菌)。数据集包括特征变量:底物类型、固液比、接种物、接种比(%)、碳氮比、温度(°C)、pH、停留时间(d)、有机负荷(g VS/(L·d))、总固体(Total Solids, TS)(g/L)、挥发性固体(Volatile Solids, VS)(g/L);目标变量:乳酸浓度(g/L)、乳酸产率(g/g VS)、乳酸生产速率(g/(L·d))。

本研究从表格、文本及图表(使用 PlotDigitizer 提取)中收集变量参数。通过数据清洗消除明显的错误和异常值,使用 k 近邻(KNN)法对缺失值进行估算,对分类特征进行 one-hot 编码处理,最终获得 330 条数据。随后,通过计算成对 Spearman 秩相关,评估所有数值变量之间的线性关系。

1.2 模型的开发与评估

80% 的预处理数据集被随机选择并标记为训练数据,剩下的 20% 被标记为测试数据,用于开发模型的最终评估。在整个模型开发和评估阶段,使用决定系数(R^2)、根均方误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)评估训练集和测试集的预测性能。 R^2 越高, RMSE 和 MAE 越低,表明预测性能越好。使用贝叶斯优化对模型进行超参数调优,通过限制树深(max depth)、叶子节点数(max leaf nodes)、增加叶片最小样本数(min samples leaf)提高模型鲁棒性。通过增强正则化强度(l2-regularization/lambda),抑制特征权重过大的问题,有效提高模型的泛化能力,降低过拟合风险。

利用 3 种机器学习模型(RF、XGB 和梯度提升回归树(GBR))比较和评估目标变量的预测强

度,选择 R^2 最高、RMSE 和 MAE 较低的为最优模型。

1.3 模型解释分析

通过 Shapley 加性解释(SHAP)和偏相关图(PDP)分析特征变量-目标变量之间的关系,以解释最优模型,并评估各输入变量的相对贡献。此外,二维偏依赖分析(2D-PDP)研究了 2 个特征变量的耦合作用对预测结果的影响。通过在二维平面上绘制 PDP,可得 2 个特征变量在不同组合下对预测结果的影响,并分析二者之间可能存在的交互作用。

1.4 因果推理分析

基于线性非高斯无环模型的独立成分分析(ICALINGAM)是一种因果推理方法,旨在揭示数据中的因果关系。该方法利用独立成分分析(ICA)识别和解释所有变量之间潜在的因果结构。

2 结果与讨论

2.1 数值变量的描述性统计

为评估机器学习模型特征变量与目标变量的代表性及数值分布规律,本研究对数据集进行可视化分析。数据集涵盖了影响发酵过程的关键物理化学参数,呈现多样化分布形态。底物特性方面:TS 和 VS 主要分布在 0~100 g/L,且整体呈现右偏分布,反映了固废发酵中常见的稀释或中低固含量特征。工艺运行参数方面:温度表现出高度集中的正态分布特征,峰值位于 35~37 °C,符合典型的中温发酵条件。pH 呈现明显的双峰分布,集中在 5.0~5.5 和 6.5~7.5,分别对应乳酸累积导致的酸性环境^[25]以及人工调节后的中性运行环境。接种与负荷方面:接种比、固液比以及有机负荷均表现出显著的右偏态,大部分数据点集中在较低数值区间,这说明训练集包含大量常规负荷案例,同时也涵盖了部分高负荷挑战性的极端工况。

乳酸浓度分布在 0~60 g/L 之间,主峰位于 5 g/L。数据主要分布在 0~30 g/L 且最大可至 55 g/L,有利于模型捕捉不同乳酸生产水平的特征。乳酸产率呈现较好的正态分布形态,中心位于 0.2~0.4 g/g VS。这表明大多数实验结果处于典型的转化率范围内。乳酸生产速率呈现明显的指数衰减式分布,大部分数据点位于 0~10 g/(L·d),高产率(>15 g/(L·d))数据量相对较少。

为初步评估变量之间的线性相关性,计算了各变量间的皮尔逊相关系数(Pearson Correlation

Coefficient, PCC, C_{PC}) 并绘制了热图(图 1), 以确定特征变量与目标变量之间的关系。 $\pm 0.80 \sim \pm 1.00$ 表示强相关, $\pm 0.50 \sim \pm 0.79$ 表示中度相关, $\pm 0.30 \sim$

± 0.49 表示弱相关, $0.00 \sim \pm 0.29$ 表示无线性关系。分析表明, 部分特征变量之间存在较强的相关性, 这反映了发酵系统存在内在物理化学联系。

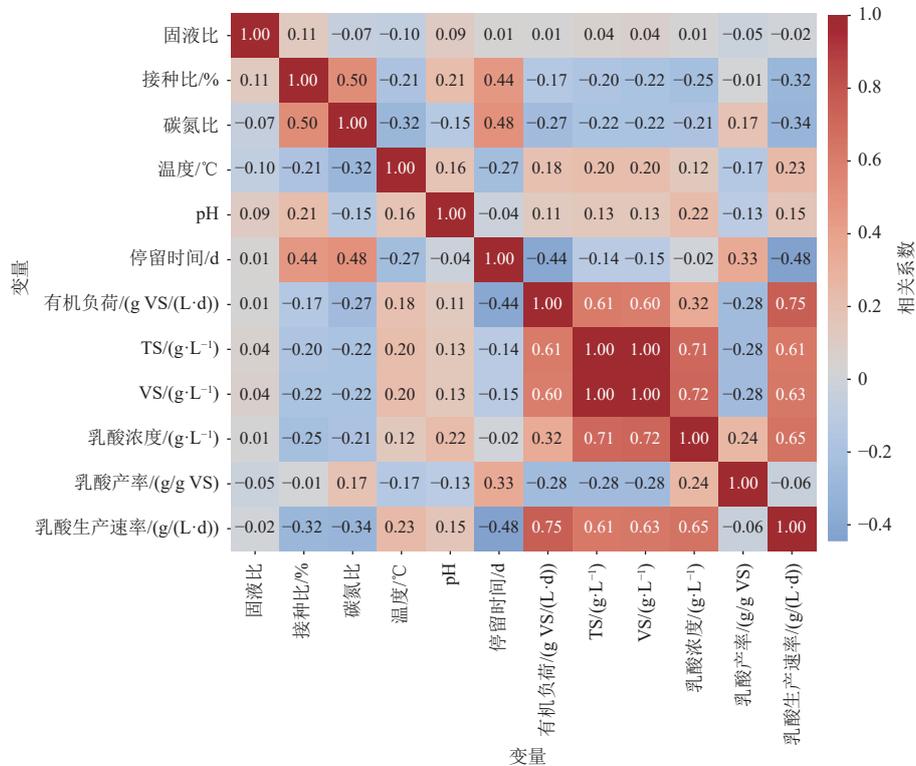


图 1 各变量间的成对 Spearman 秩相关性

Fig. 1 Pairwise spearman rank correlations among all numerical variables

不同目标变量受特征变量的影响程度存在明显差异。乳酸浓度与 VS ($C_{PC}=0.72$) 和 TS ($C_{PC}=0.71$) 存在中等正相关性, 这说明在厌氧发酵中, 增加初始有机废弃物负荷有利于提升乳酸浓度。乳酸生产速率与有机负荷呈现中等的正相关 ($C_{PC}=0.75$), 并与停留时间呈弱负相关性 ($C_{PC}=-0.48$)。这符合生物发酵动力学规律, 即提高单位时间内的底物投加量并缩短反应周期能显著提升乳酸生产速率。乳酸产率与其他变量的相关性普遍较低, 与停留时间呈弱正相关 ($C_{PC}=0.33$), 与有机负荷无相关性 ($C_{PC}=-0.28$)。虽然大部分结果表明了变量间较弱的线性相关性, 但这并不意味着他们之间缺乏关系, 而是反映出乳酸生产实际受多因素间复杂的非线性相互作用所调控。目前, 影响有机固废厌氧发酵产乳酸变量之间的复杂关系尚不明晰。

2.2 最佳模型的选择

基于上述特征变量, 采用 XGB、RF 和 GBR 3 种机器学习模型预测乳酸浓度、乳酸产率和乳

酸生产速率。图 2(a)~(c) 展示了 3 个目标变量的最优模型的原始值和预测值。对于乳酸浓度预测, XGB 模型(图 2(a))测试集的 R^2 (0.915) 高于 RF 模型(0.892) 和 GBR 模型(0.912)。对于乳酸产率预测, XGB 模型的 R^2 (0.790) 大于 RF 模型 (0.712) 和 GBR 模型(0.743)。对于乳酸生产速率预测, XGB 模型的 R^2 (0.840) 大于 RF 模型(0.800) 和 GBR 模型(0.833)。相较其他模型, XGB 模型取得了最高的 R^2 以及较低的 RMSE 和 MAE, 表现出良好的预测精度。通过学习曲线图(图 2(d)~(f)) 可知, 训练集和测试集误差同步快速下降, 这表明模型泛化能力稳定, 误差趋于平稳说明模型复杂度合适, 未过度拟合。最终选择 XGB 为最佳模型。

2.3 识别目标变量的驱动因素

通过特征重要性分析, 预测了最优模型中各影响因素的相对贡献, 结果如图 3 所示。对于乳酸浓度(图 3(a)), 4 个最重要的特征变量是 VS、TS、停留时间和有机负荷。对于乳酸产率(图 3

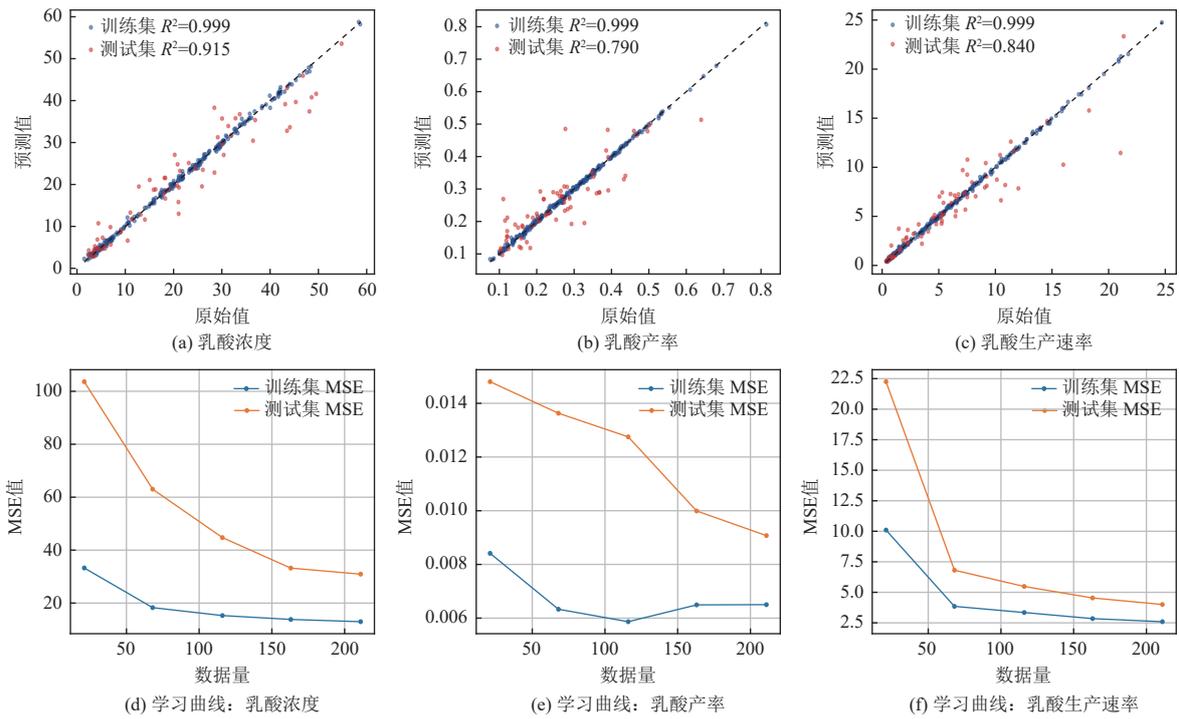


图 2 XGB 模型对乳酸浓度 (a、d)、乳酸产率 (b、e) 和乳酸生产速率 (c、f) 的预测值与实际值散点图和学习曲线图

Fig. 2 Scatter plots of predicted vs. actual values and learning curves of the XGB model for lactic acid concentration (a, d), yield (b, e), and production rate (c, f)

(b)), 最重要的特征变量是停留时间、TS、有机负荷和底物类型。乳酸生产速率(图 3(c))特征变量的排序依次为有机负荷、停留时间、VS 和 TS。接种物的类型对乳酸生产的影响也不可忽视, 合适的接种物可以显著提升乳酸的生产。pH、碳氮

比、温度等影响因素排名靠后, 因为在大多数实验中这些变量通常为乳酸菌生长适宜范围(如 pH 5.5~7.0, 温度为 35~55 °C), 故这些影响因素波动对模型的边际贡献相对较小。确定重要影响因素为后续优化工艺参数提供了重要基础。

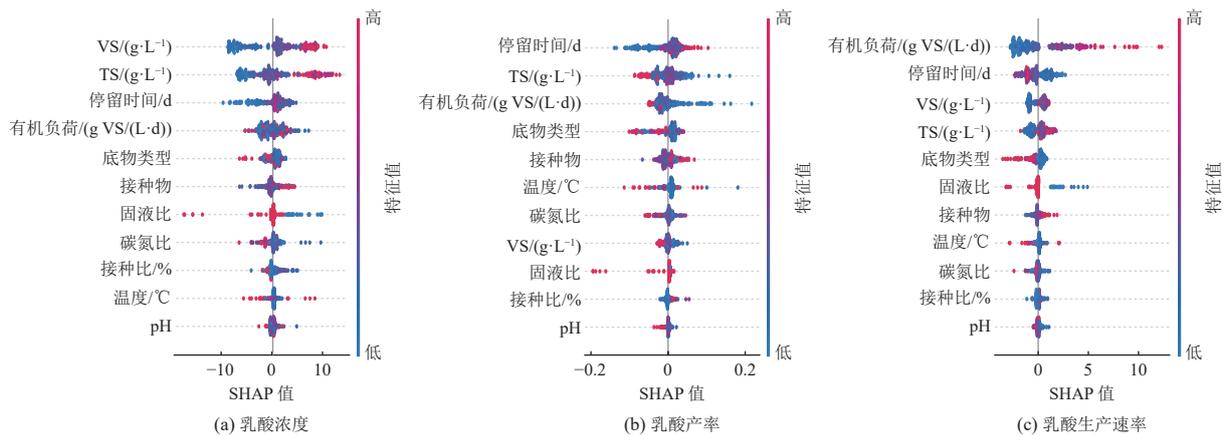


图 3 基于 SHAP 方法的特征变量对乳酸浓度 (a)、乳酸产率 (b) 和乳酸生产速率 (c) 的影响

Fig. 3 Impact of feature variables on lactic acid concentration (a), yield (b), and production rate (c) based on the SHAP method

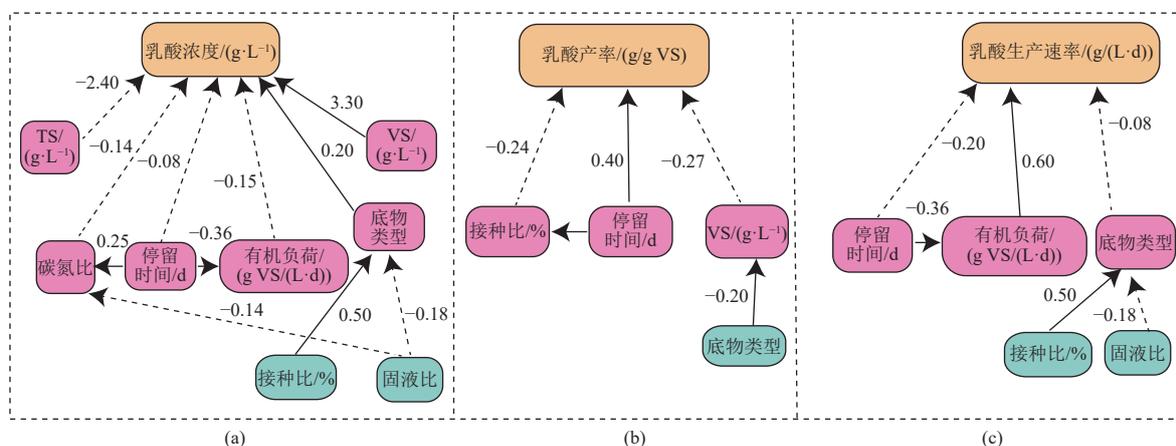
2.4 识别特征变量与目标变量之间的因果关系

因果推理可有助于了解影响因素与乳酸生产工艺的因果关系, 这对于有针对性地制定更有效的操作条件至关重要。基于 LiNGAM 模型对特

征变量与目标变量之间的因果关系进行识别, 结果如图 4 所示。图 4(b)表明, 停留时间对乳酸产率具有显著的正向直接效应(平均因果效应 (ATE), $E_{AT}=0.40$), 而在图 4(c)中, 其对乳酸生产

速率则呈现负向影响($E_{AT}=-0.20$)。同时,有机负荷是乳酸生产速率最主要的直接正向驱动因素($E_{AT}=0.60$),但在图 4(a)中对乳酸浓度产生负向干扰,与 TS 类似。此外,模型还识别出底物类型

与接种比对乳酸生产过程存在直接或间接的调控路径,其中接种比对乳酸产率表现出负向因果效应($E_{AT}=-0.24$)。



注:直线上的数字表示 ATE, ATE 大于 0 表示该特征对特征或目标变量具有正向因果效应,反之,具有负向因果效应。

图 4 使用 LiNGAM 模型确定特征变量与乳酸浓度 (a)、乳酸产率 (b) 和乳酸生产速率 (c) 之间的因果关系

Fig. 4 Causal relationships between feature variables and lactic acid concentration (a), yield (b), and production rate (c) determined using the LiNGAM model

上述结果可从发酵过程机理加以解释。停留时间的延长有利于复杂有机固废中纤维素和蛋白质的充分水解,该阶段通常为系统的限速步骤,从而提升总体乳酸产率^[26]。然而,随着停留时间进一步增加,底物逐渐耗尽,菌群由指数生长期转入减速生长期;同时,乳酸等代谢副产物的累积会抑制乳酸脱氢酶活性,导致单位时间内的乳酸生成速率下降^[27]。

尽管提高有机负荷能够显著促进乳酸生产速率,但过高的有机负荷与 TS 水平会引发物理与生物层面的双重限制。一方面,高 TS 条件下体系黏度增加,传质阻力加大,限制了底物向微生物细胞表面的扩散^[28];另一方面,高渗透压胁迫会诱导乳酸菌启动应激代谢,消耗“三磷酸腺苷(ATP)”合成相容性溶质,从而减少碳源向乳酸合成途径的分配比例,最终抑制乳酸浓度的提升^[29]。

底物类型与接种比的因果路径反映了发酵过程中“底物-菌群”适配性的演替规律。不同有机固废在碳氮比和可降解性方面存在差异^[30],合理的接种比有助于同型乳酸发酵菌在特定底物条件下快速占据优势。然而,过高的初始接种量可能导致营养物质在产酸初期被过快消耗,使菌群提前进入衰亡阶段,从而限制总体乳酸产率的进一步提升^[31]。

在低噪声、线性主导且数据分布呈非高斯特征条件下, LiNGAM 可提供有意义的因果洞察,但其对发酵系统中固有的非线性动力学和时变因果关系刻画能力有限。因此,图 4 的因果结构主要反映系统的平均静态效应,在实际工艺优化中仍需结合机理模型与动态分析方法加以验证和补充。

2.5 确定关键特征变量的适宜范围

基于重要性分析和因果推理,本研究对前 4 个特征变量的 PDP 进行了分析(图 5),其它重要特征对目标变量的 PDP 分析见图 S3。

乳酸浓度随 VS(图 5(a))和 TS(图 5(b))的增加呈现显著的阶梯式上升趋势。当 VS 超过 50 g/L 且 TS 超过 100 g/L 时,乳酸浓度趋于稳定高位,表明充足的底物为微生物转化提供了充足的碳源,但也存在底物抑制的阈值^[32-33]。停留时间(图 5(c))在 5 d 附近达到峰值后略有回落并趋于平稳,说明短期的快速发酵足以实现高浓度积累。乳酸浓度随有机负荷(图 5(d))的增加呈匀速下降的趋势,可能因高有机负荷缩短停留时间,微生物无法充分积累乳酸;随后增加至 80 g VS/(L·d) 时,乳酸浓度趋于稳定,推测为底物抑制或传质限制使代谢达到平衡^[26]。由此可知在 VS>50 g/L、TS>100 g/L、停留时间 2.5~15.0 d、有机负荷<18 g VS/(L·d) 时,乳酸浓度可达 20 g/L 以上。

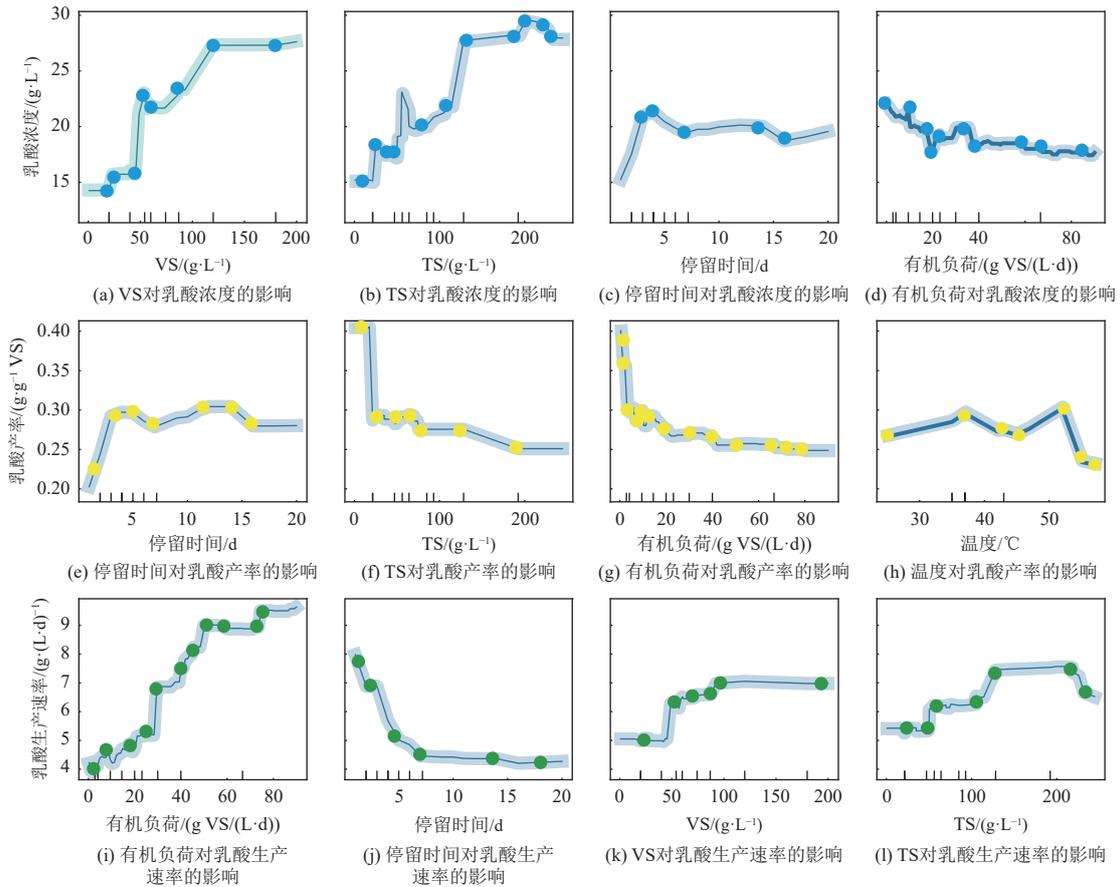


图 5 XGB 模型的 4 个重要特征对乳酸浓度 (a~d)、乳酸产率 (e~h) 和乳酸生产速率 (i~l) 影响的 PDP 图

Fig. 5 PDP plots illustrating the effects of four key features on lactic acid concentration (a-d), yield (e-h), and production rate (i-l) based on the XGB model

乳酸产率随有机负荷(图 5(g)) 和 TS(图 5(f)) 的增加表现出明显的下降趋势。尤其是在低有机负荷($<10 \text{ g VS}/(\text{L}\cdot\text{d})$) 和低 TS 条件下, 产率达到最高。这反映了在高负荷条件下, 由于副产物积累或底物利用率下降, 碳源向乳酸转化的效率降低^[34]。乳酸产率随停留时间(图 5(e)) 的增加先升后降, 在 5~15 d 之间表现最佳。乳酸发酵的适宜温度取决于使用的底物和接种物, 即纯培养物的适宜温度范围(图 5(h)) 在 30~45 °C 之间^[35], 而混合微生物群的最佳温度范围较大的, 一些嗜热微生物在 50 °C 左右也能产生大量乳酸。故在停留时间 5~15 d、TS $<25 \text{ g/L}$ 、有机负荷 $<10 \text{ g VS}/(\text{L}\cdot\text{d})$ 、温度 30~45 °C 时, 乳酸产率可至 0.30 g/g VS 左右。

有机负荷(图 5(i)) 对乳酸生产速率表现出强烈的正相关性。随着有机负荷从 10 g VS/(L·d) 增加至 60 g VS/(L·d), 生产速率接近线性增长。这表明了在未到达系统负荷极限前, 提高进料频率是提升乳酸生产强度的直接手段^[31]。停留时间(图 5(j)) 对乳酸生产速率呈明显的负相关。较短

的停留时间下乳酸生产速率最高, 随后迅速衰减, 符合生产速率的动力学特征。乳酸生产速率随 VS(图 5(k)) 和 TS(图 5(l)) 的增加而提升, 在 VS 达到 100 g/L 后趋于稳定。最终可知在有机负荷 $>30 \text{ g VS}/(\text{L}\cdot\text{d})$ 、停留时间 $<3 \text{ d}$ 、VS $>100 \text{ g/L}$ 、TS $>130 \text{ g/L}$ 时, 乳酸生产速率可至 7 g/(L·d) 以上。

除此之外, 固液比、接种比、碳氮比、接种物、pH 等对乳酸生产水平具有一定影响。一般来说, pH 保持在 5~7 之间, 因为乳酸的产生降低了发酵过程中系统的 pH, 进一步导致微生物生长水平下降, 影响乳酸生产^[36]。适宜范围的 C/N 对乳酸发酵具有积极影响, 而选择乳酸生产水平高且经济可行的底物类型和接种物也十分重要^[26]。接种比的大小对微生物增殖、乳酸生产的提高有重要作用, 一般采用 5%~10% 接种量抑制异乳酸发酵, 减少滞后期。然而, 接种量大于 5% 可能会增加工艺成本^[26]。

2.6 双驱动因素相互作用对目标变量的影响

基于以上研究, TS 和停留时间是有机固废厌

氧发酵产乳酸极为重要的因素。因此,使用 2D-PDP 研究 TS 和停留时间对乳酸生产的联合影响(图 6)。

从图 6(a)可以看出,乳酸浓度在高 TS(200~250 g/L)与短停留时间(2.5~5.0 d)的组合区域达到了极大值(约 36.75 g/L)。这表明在高浓度下,较短的反应周期更有利于乳酸的积累^[37]。当停留时间超过 7.5 d 后,即使在高 TS 条件下,乳酸浓度也出现明显下降,这可能归因于高固体环境下长期发酵导致代谢产物抑制或副产物的竞争性生成^[38]。

图 6(b)显示乳酸产率的高值区主要集中在低 TS 水平(<25 g/L)。在 TS 较低时,乳酸产率对

停留时间的波动相对不敏感,但在 10~15 d 的中长停留时间下达到峰值(>0.47 g/g VS)。随着 TS 的增加,乳酸产率呈现明显的下降趋势,说明高浓度底物下系统会发生复杂的副反应^[39],同时也增加了与产物回收相关的成本。

图 6(c)呈现明显的层状分布特征,表明停留时间是影响乳酸生产速率的主导因素。最高值(>9.57 g/(L·d))出现在极短的停留时间(<3 d)范围内,且在整体 TS 跨度内表现出较好的稳定性。随着停留时间的延长,乳酸生产速率迅速衰减,即发酵初期的反应速率高于后期。

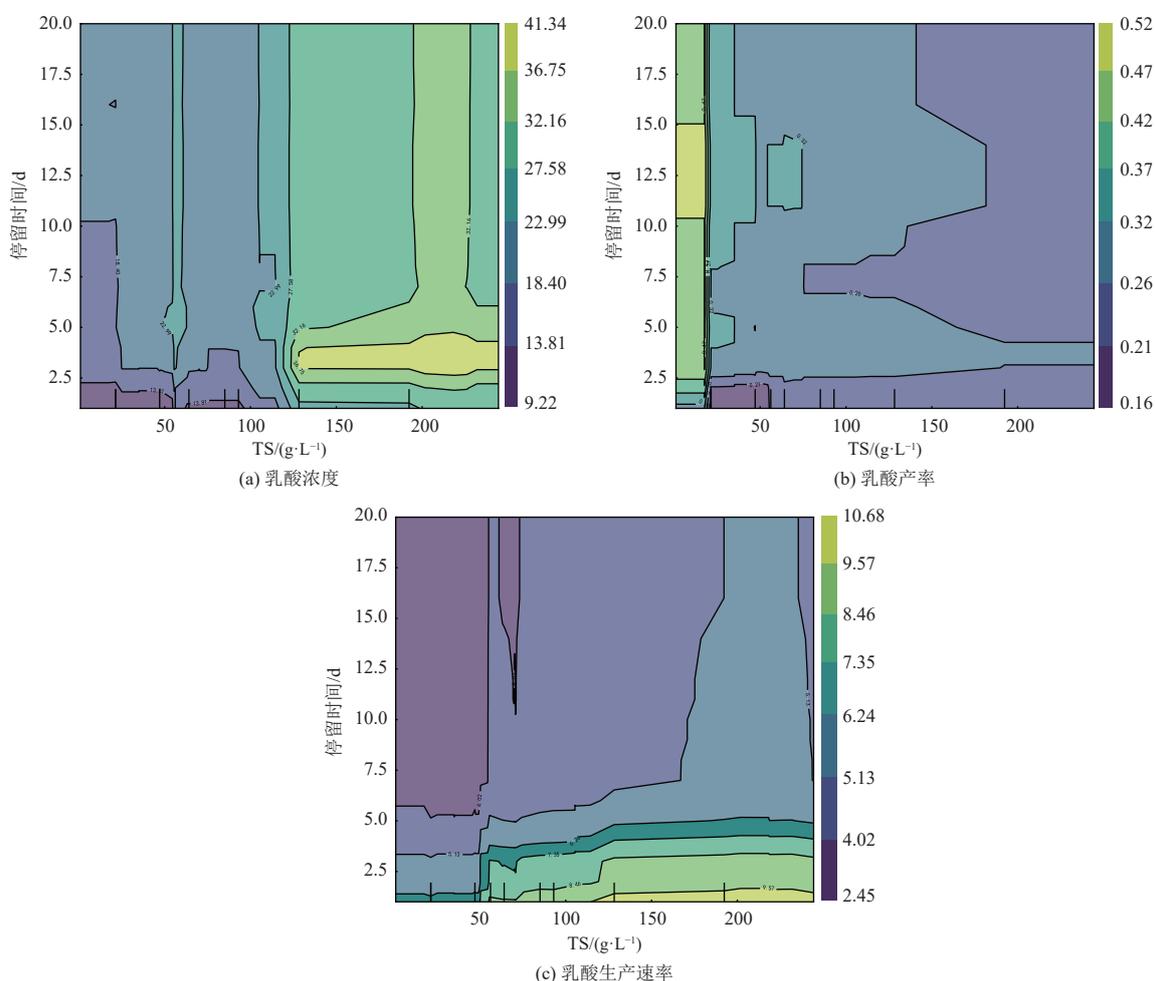


图 6 TS 和停留时间相互作用影响乳酸浓度 (a)、乳酸产率 (b) 和乳酸生产速率 (c) 的 2D-PDP 图

Fig. 6 2D-PDP plots illustrating the interactive effects of TS and HRT on lactic acid concentration (a), yield (b), and production rate (c)

了解驱动因素间相互作用对确定合适的有机固废厌氧发酵生产乳酸条件至关重要。未来的研究应同时注重发酵模式、底物预处理方式对乳酸生产水平的影响,以推进有机固体废弃物厌氧发酵乳酸生产的规模化。

3 结 论

本研究对有机废弃物厌氧发酵乳酸生产水平进行了机器学习的预测和参数优化。XGB 模型有效预测了有机废弃物厌氧发酵乳酸生产水平。停

留时间、TS、VS 和有机负荷是影响有机废弃物厌氧发酵产乳酸的重要因素。结合一维和二维偏依赖分析确定了合适的参数范围: VS>50 g/L、TS 为 200~250 g/L、停留时间为 2.5~5.0 d、有机负荷<18 g VS/(L·d) 时, 乳酸浓度可达 20 g/L 以上; 停留时间 10~15 d、TS<25 g/L、有机负荷<10 g VS/(L·d)、温度 30~45 °C 时, 乳酸产率可达 0.30 g/g VS 以上; 有机负荷>30 g VS/(L·d)、停留时间<3 d、VS>100 g/L、TS>130 g/L 时, 乳酸生产速率可达 7 g/(L·d) 以上。这些发现为有机废弃物厌氧发酵生产乳酸的实验设计提供了指导, 可提高乳酸生产效率, 促进其规模化应用。

参考文献 (References) :

- [1] EŞ I, MOUSAVI KHANEGHAH A, BARBA F J, et al. Recent advancements in lactic acid production—A review[J]. *Food Research International*, 2018, 107: 763–770.
- [2] AHMAD A, BANAT F, TAHER H. A review on the lactic acid fermentation from low-cost renewable materials: Recent developments and challenges[J]. *Environmental Technology & Innovation*, 2020, 20: 101138.
- [3] 冯雷雨, 袁飞怡, 刘峰, 等. 餐厨垃圾发酵产乳酸研究进展[J]. 同济大学学报(自然科学版), 2021, 49(12): 1688–1700.
FENG Leiyu, YUAN Feiyi, LIU Feng, et al. Research progress on lactic acid production from food waste by fermentation[J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2021, 49(12): 1688–1700.
- [4] CHEN Poting, HONG Z S, CHENG C L, et al. Exploring fermentation strategies for enhanced lactic acid production with polyvinyl alcohol-immobilized *Lactobacillus plantarum* 23 using microalgae as feedstock[J]. *Bioresource Technology*, 2020, 308: 123266.
- [5] MAYER F, BHANDARI R, GÁTH S. Critical review on life cycle assessment of conventional and innovative waste-to-energy technologies[J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 672: 708–721.
- [6] WEI Yufang, GAO Jun, SHI Zhengui, et al. Effect of hydrothermal pretreatment on two-stage anaerobic digestion of food waste and *Enteromorpha*: Digestion performance, bioenergy efficiency, and microbial community dynamics[J]. *Fuel*, 2022, 318: 123639.
- [7] BRAGUGLIA C M, GALLIPOLI A, GIANICO A, et al. Anaerobic bioconversion of food waste into energy: A critical review[J]. *Bioresource Technology*, 2018, 248: 37–56.
- [8] LÓPEZ GÓMEZ J P, ALEXANDRI M, SCHNEIDER R, et al. A review on the current developments in continuous lactic acid fermentations and case studies utilising inexpensive raw materials[J]. *Process Biochemistry*, 2019, 79: 1–10.
- [9] ALVES DE OLIVEIRA R, KOMESU A, VAZ ROSSELL C E, et al. Challenges and opportunities in lactic acid bioprocess design—From economic to production aspects[J]. *Biochemical Engineering Journal*, 2018, 133: 219–239.
- [10] NOVY V, BRUNNER B, NIDETZKY B. L-Lactic acid production from glucose and xylose with engineered strains of *Saccharomyces cerevisiae*: Aeration and carbon source influence yields and productivities[J]. *Microbial Cell Factories*, 2018, 17(1): 59.
- [11] MA Xiaoyu, WANG Juan, GAO Ming, et al. Effect of pH regulation mode on byproduct ethanol generated from the lactic acid fermentation of *Sophora flavescens* residues[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 279: 123536.
- [12] HUANG Yueying, WANG Yu, SHANG Nan, et al. Microbial fermentation processes of lactic acid: Challenges, solutions, and future prospects[J]. *Foods*, 2023, 12(12): 2311.
- [13] KOUTINAS A A, VLYSIDIS A, PLEISSNER D, et al. Valorization of industrial waste and by-product streams via fermentation for the production of chemicals and biopolymers[J]. *Chemical Society Reviews*, 2014, 43(8): 2587.
- [14] CAO Jingwen, ZHOU Hongzhang, WANG Xuekai, et al. Game changer for anaerobic fermentation of paper mulberry: Sucrose-loaded biochar enhancing microbial communities and lactic acid fermentation[J]. *Bioresource Technology*, 2024, 414: 131552.
- [15] KIM J, KIM Y M, LEBAKA V R, et al. Lactic acid for green chemical industry: Recent advances in and future prospects for production technology, recovery, and applications[J]. *Fermentation*, 2022, 8(11): 609.
- [16] THAKUR A, PANESAR P S, SAINI M S. Optimization of process parameters and estimation of kinetic parameters for lactic acid production by *Lactobacillus casei* MTCC 1423[J]. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 2019, 9(2): 253–266.
- [17] KWAN T H, VLYSIDIS A, WU Zhiliang, et al. Lactic acid fermentation modelling of *Streptococcus thermophilus* YI-B1 and *Lactobacillus casei* Shirota using food waste derived media[J]. *Biochemical Engineering Journal*, 2017, 127: 97–109.
- [18] TASHIRO Y, INOKUCHI S, POUDEL P, et al. Novel pH control strategy for efficient production of optically active L-lactic acid from kitchen refuse using a mixed culture system[J]. *Bioresource Technology*, 2016, 216: 52–59.
- [19] PROBST M, WALDE J, PÜMPPEL T, et al. Lactic acid fermentation within a cascading approach for biowaste treatment[J]. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 2015, 99(7): 3029–3040.
- [20] LIAO Zhiyang, LU Jinrong, XIE Kunting, et al. Prediction of photochemical properties of dissolved organic matter using machine learning[J]. *Environmental Science & Technology*, 2023, 57(46): 17971–17980.

- [21] LONG Fei, FAN J, XU Weichao, et al. Predicting the performance of medium-chain carboxylic acid (MCCA) production using machine learning algorithms and microbial community data[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 377: 134223.
- [22] LONG Fei, FAN J, LIU Hong. Prediction and optimization of medium-chain carboxylic acids production from food waste using machine learning models[J]. *Bioresource Technology*, 2023, 370: 128533.
- [23] DE CLERCQ D, WEN Zongguo, FEI Fan, et al. Interpretable machine learning for predicting biomethane production in industrial-scale anaerobic co-digestion[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 712: 134574.
- [24] MA Hongzhi, LIU Yichan, ZHAO Jihua, et al. Explainable machine learning-driven predictive performance and process parameter optimization for caproic acid production[J]. *Bioresource Technology*, 2024, 410: 131311.
- [25] SIDDIQUE M N I, WAHID Z A. Achievements and perspectives of anaerobic co-digestion: A review[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2018, 194: 359–371.
- [26] RAWOOF S A A, KUMAR P S, VO D N, et al. Production of optically pure lactic acid by microbial fermentation: A review[J]. *Environmental Chemistry Letters*, 2021, 19(1): 539–556.
- [27] LIAO Chaosheng, ZHANG Mingjie, WANG Pan, et al. Advancing lactic acid Fermentation: Effects of micro aeration and herbal waste on red clover bioconversion[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 509: 161427.
- [28] GONZÁLEZ LEOS A, DE TAMAULIPAS U A, BUSTOS VÁZQUEZ M G, et al. Kinetics of lactic acid fermentation from sugarcane bagasse by *Lactobacillus pentosus*[J]. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 2019, 19(1): 377–386.
- [29] ABOSEIDAH A A, RASMEY A H M, OSMAN M M, et al. Optimization of lactic acid production by a novel strain, *Enterococcus faecalis* Ky072975 isolated from infants stool in Egypt[J]. *European Journal of Biological Research*, 2017, 7(1): 22–30.
- [30] BOUABIDI Z B, EL NAAS M H, ZHANG Zhien. Immobilization of microbial cells for the biotreatment of wastewater: A review[J]. *Environmental Chemistry Letters*, 2019, 17(1): 241–257.
- [31] PÉREZ RANGEL M, BARBOZA-CORONA J E, VALDEZ-VAZQUEZ I. Effect of the organic loading rate and temperature on hydrogen production *via* consolidated bioprocessing of raw lignocellulosic substrate[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023, 48(92) : 35907–35918.
- [32] DE GROOF V, COMA M, ARNOT T, et al. Selecting fermentation products for food waste valorisation with HRT and OLR as the key operational parameters[J]. *Waste Management*, 2021, 127: 80–89.
- [33] TIAN Xiwei, WANG Yonghong, CHU Ju, et al. Exploring cellular fatty acid composition and intracellular metabolites of osmotic-tolerant mutant *Lactobacillus paracasei* NCBIO-M2 for highly efficient lactic acid production with high initial glucose concentration[J]. *Journal of Biotechnology*, 2018, 286: 27–35.
- [34] NAGARAJAN D, CHEN C Y, ARIYADASA T U, et al. Macroalgal biomass as a potential resource for lactic acid fermentation[J]. *Chemosphere*, 2022, 309: 136694.
- [35] WANG Ying, TASHIRO Y, SONOMOTO K. Fermentative production of lactic acid from renewable materials: Recent achievements, prospects, and limits[J]. *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 2015, 119(1): 10–18.
- [36] CHENEBAULT C, MOSCOVIZ R, TRABLY E, et al. Lactic acid production from food waste using a microbial consortium: Focus on key parameters for process upscaling and fermentation residues valorization[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 354: 127230.
- [37] YUAN Quan, LOU Yuqing, WU Juanjuan, et al. Long-term semi-continuous acidogenic fermentation for food wastes treatment: Effect of high organic loading rates at low hydraulic retention times and uncontrolled pH conditions[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 357: 127356.
- [38] SONG Liang, YANG Donghai, LIU Rui, et al. Microbial production of lactic acid from food waste: Latest advances, limits, and perspectives[J]. *Bioresource Technology*, 2022, 345: 126052.
- [39] ZHANG Wenjuan, XU Xianbao, YU Pingfeng, et al. Ammonium enhances food waste fermentation to high-value optically active l-lactic acid[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2020, 8(1): 669-677.