

基于生态槽实验的藻类生长参数确定

逢勇¹, 丁玲¹, 高光²

(1. 河海大学环境科学与工程学院, 南京 210098; 2. 中国科学院南京地理与湖泊研究所, 南京 210008)

摘要:在太湖湖泊生态系统研究站的生态模拟槽中进行了藻类的动态模拟实验. 取太湖原水至生态槽中, 在温度、光照、营养盐变化条件下进行采样, 观察藻类的变化情况. 在生态槽实验基础上应用 PHREEQC 模型建立了藻类生长模型, 模型中考虑了氮及磷营养盐的循环过程. 利用生态模拟槽实验结果对太湖藻类生长模型的各参数进行了详细的率定验证, 并应用最小二乘法确定最佳的一组参数, 藻类及各种营养盐浓度的模拟值均能较好地拟合实验测量值.

关键词:生态槽实验; PHREEQC 模型; 藻类生长模型; 最小二乘法; 参数确定

中图分类号: X524; X171.5 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2005)03-0078-05

Parameter Determination of Algae Growth Based on Ecological Tank Experiment

PANG Yong¹, DING Ling¹, GAO Guang²

(1. College of Environmental Science and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China; 2. Nanjing Institute of Geography & Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China)

Abstract: A dynamic simulation experiment of algae in an ecological tank was performed at the Taihu Laboratory for Lake Ecosystem Research. During the experiment, water from Taihu Lake was infused into the ecological tank and samples were taken continually to observe algae growth under varying conditions, such as temperature, sunlight and nutrients. Based on the experiment, an algae growth model, considering nitrogen and phosphorus cycle, was developed by using the advanced PHREEQC model. After that, a detailed calibration and validation of parameters in the model were done on the basis of experimental results. The least square method was used to determine the optimal set of parameters. The calculated values of algae and nutrient concentrations show fairly satisfying fitness with measured data.

Key words: ecological tank experiment; PHREEQC model; algae growth model; least square method; parameter determination

近年来,随着太湖水体富营养化的加剧,藻类大量繁殖,致使水体透明度下降,水质恶化,严重破坏了太湖的生态环境.太湖藻类水华的频繁暴发,严重影响了周边地区的工农业供水和湖面景观,从而制约了周边地区的经济发展.因此,对藻类水华暴发机理的研究显得尤为迫切和必要.迄今国内已有大量文献报道了藻类的种间关系及其与环境的相关关系^[1~3],但运用模拟方法揭示藻类动态变化机制的研究尚不多见.近 2 年建立的一些太湖藻类生态动力学模型^[5,6],其参数的确定大部分是根据野外资料得出,由于目前太湖的野外监测资料存在较明显的时空不一致性,这对模型参数率定的精度产生了较大影响.为了更精确地模拟太湖藻类的动态变化机制,本研究取太湖源水至太湖湖泊生态系统研究站的生态模拟槽中,在一定的实验室条件下进行藻类的动态模拟实验.应用国外先进的 PHREEQC 模型进行了藻类生长的数学模型研究,并利用生态模拟槽的实验结果对模型进行了较为详细的率定验证,确定了模型的各种参数.模型的建立有助于对太湖藻类水华进行模拟预测,进而建立藻类水华预警

预报系统.

1 生态槽实验

1.1 实验概况

实验于 1999-05-24 ~ 06-24 进行.生态槽长 6.5 m、宽 1.3 m、高 1.6 m,其平面布置图见图 1.槽中装太湖水,水深为 1.15 m.实验期间将空调打开,温度基本维持在 25℃左右,每天测一次水温.光源为自然太阳光,每天测一次光强.藻类在温度、光照及水中营养盐等条件下动态地变化.实验开始后,隔天待生态槽中系统稳定,于 26 日进行初次采样,测定系统中藻类和各营养盐的初始状况.此后不断采样,测量藻类和各种营养盐的变化情况,测量数据用于模型参数率定和验证.

1.2 实验仪器及方法

光强的测定选用美国 LI-COR 公司生产的水下

收稿日期: 2004-05-20; 修订日期: 2004-10-26

基金项目: 国家 863 计划资助项目(2003 AA6011002); 国家自然科学基金资助项目(50239030)

作者简介: 逢勇(1958~),男,教授,主要从事水环境方面研究.

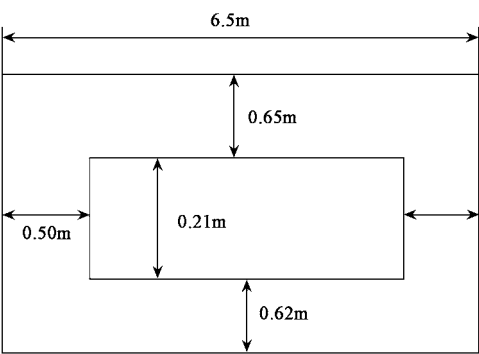


图 1 生态槽平面示意图

Fig.1 The schematic plan of ecological tank

光量子仪,它能精确测定水下光合有效辐射(400 ~

700nm) 强度,在混浊水体中光强低于 0.01 mol/(m²·s)还能测定.叶绿素 a 的测定采用分光光度法,选用的仪器为上海仪器厂生产的 7230 分光光度计.计算公式为:

[Chl-a] = 27.9(E_b - E_a) V_e/ V

式中,[Chl-a] 为叶绿素 a 的浓度,E_a 为提取液酸化前波长 665nm 和 750nm 处的光密度差,E_b 为提取液酸化后波长 665nm 和 750nm 处的光密度差,V_e 为提取液体积,V 为抽滤水样体积.泵选用 QY 油浸式潜水泵,营养盐浓度的测定参见文献[7].

1.3 实验结果

06-03 ~ 06-07 ,06-14 ~ 06-22 日生态槽中测定的藻类及各种营养盐浓度见表 1 .

表 1 生态槽实验结果

Table 1 Results of ecologic tank experiment

日期/月-日	测量时间 / o' clock	藻类叶绿素 / μg·L ⁻¹	有机磷 / mg·L ⁻¹	无机磷 / mg·L ⁻¹	有机氮 / mg·L ⁻¹	氨氮 / mg·L ⁻¹	硝态氮 / mg·L ⁻¹
06-03	09:00	29.17	0.0535	0	0.734	0	0.669
06-04	09:00	17.87	0.0358	0.0013	0.655	0.0057	0.609
06-05	09:00	14.3	0.0341	0.002	0.702	0.009	0.551
06-06	09:00	9.7	0.0379	0.0034	0.67	0.011	0.516
06-07	09:00	12.57	0.0386	0.0043	0.685	0.003	0.542
06-14	09:00	8.2	0.068	0.0043	0.841	0.014	0.695
06-18	09:00	8.83	0.086	0.0053	0.993	0	0.841
06-19	09:00	17.3	0.095	0.0087	1.003	0	0.954
06-20	09:00	21.6	0.099	0.005	1.133	0	0.995
06-21	09:00	19.9	0.103	0.003	1.203	0	0.984
06-22	09:00	14.17	0.106	0.02	1.325	0.049	1.041

2 太湖藻类生长模型建立

近年来已有诸多文献对太湖藻类生态过程及其限制性环境因子进行了研究[4,8],普遍认为太湖藻类生态过程除了自身生理因素外,主要与光照、温度和氮、磷营养盐有关,相关关系可用图 2 表示.

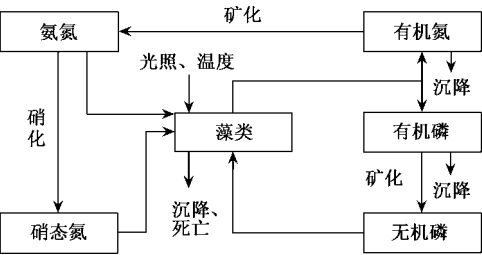


图 2 藻类及营养盐关系

Fig.2 Relationship between algae and nutrients

PHREEQC 是近年来发展起来的描述动态生物化学反应的水文地球化学模拟软件.在国外已有较多应用[9 ~ 13],在国内应用甚少.本文将 PHREEQC 应用于太湖藻类的动态模拟中,建立了太湖藻类生长模型.

2.1 模型基本方程

∂ c₁ / ∂ t = [G_{PI} - D_{PI} - (V_{SI}/D)] c₁ (1)

∂ c₂ / ∂ t = D_{PI} · c₁ · a_{PC} - K₂₃ θ₂₃^{T-20} · X_{PRC} · c₂ - (V_{S3}/D) (1 - f_{D2}) c₂ (2)

∂ c₃ / ∂ t = K₂₃ θ₂₃^{T-20} · X_{PRC} · c₂ - G_{PI} · c₁ · a_{PC} - (V_{S5}/D) (1 - f_{D3}) c₃ (3)

$$\frac{\partial c_4}{\partial t} = D_{P1} \cdot c_1 \cdot a_{NC} - K_{45} \theta_{45}^{T-20} \cdot X_{PRC} \cdot c_4 - \frac{V_{S3}(1 - f_{D4})}{D} c_4 \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_5}{\partial t} = K_{45} \theta_{45}^{T-20} X_{PRC} \cdot c_4 - G_{P1} \cdot a_{NC} \cdot c_1 \cdot P_{NH_3} - K_{56} \theta_{56}^{T-20} c_5 \quad (5)$$

$$\frac{\partial c_6}{\partial t} = K_{56} \theta_{56}^{T-20} \cdot c_5 - G_{P1} \cdot a_{NC} \cdot c_1 (1 - P_{NH_3}) \quad (6)$$

式中, c_1 为藻类叶绿素浓度;

G_{P1} 为营养盐浓度、水温、太阳辐射对藻类生长率的综合影响项:

$$G_{P1} = G(N) \cdot f(T) \cdot G(I)$$

其中, $G(N)$ 为营养盐浓度对藻类生长率的影响项, $f(T)$ 为温度对藻类生长率的影响项, $G(I)$ 为太阳辐射对藻类生长率的影响项:

$$G(N) = \min \left[\frac{N}{K_N + N}, \frac{P}{K_P + P} \right]$$

N 、 P 为氮、磷的浓度, K_N 、 K_P 为氮、磷的半饱和常数.

$$f(T) = K_{1C} \theta_{1C}^{T-20}$$

K_{1C} 为藻类在 20 °C 时的生长率; θ_{1C} 为一常数.

$$G(I) = \frac{I}{K_I + I}$$

I 为光照强度, K_I 为光的半饱和常数.

$$D_{P1} = K_{1R} \theta_{1R}^{T-20} + K_{1D}$$

K_{1R} 为藻类的呼吸率, K_{1D} 为藻类死亡率, θ_{1R} 为一系数;

V_{S1} 为藻类沉降速度; D 为水深.

c_2 为有机磷的浓度; K_{23} 为矿化率常数; $X_{PRC} = \frac{c_1}{K_P + c_1}$ 为浮游植物影响矿化项; θ_{23} 为一系数; a_{PC} 为磷-碳比; V_{S3} 为有机物的沉降速度; f_{D2} 为溶解的有机磷份数.

c_3 为无机磷(正磷酸盐磷)的浓度; V_{S5} 为无机磷的沉降速度; f_{D3} 为湖水中溶解无机磷份数.

c_4 为有机氮的浓度; K_{45} 为矿化率常数, θ_{45} 为一系数; a_{NC} 为氮-碳比; f_{D4} 为溶解的有机氮份数.

c_5 为氨氮的浓度; P_{NH_3} 为偏氮系数, K_{56} 为硝化率常数, θ_{56} 为一系数.

c_6 为硝酸盐氮的浓度.

2.2 数值解法

对上述 6 个偏微分方程采用五阶龙格-库塔算

法进行积分^[14,15].以藻类为例,(1)式可简化为:

$$\frac{dc_1}{dt} = F(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, t)$$

则计算公式为:

$$c_{1,i+1} = c_{1,i} + \Delta t \varphi(t_i, c_{1,i}, c_{2,i}, c_{3,i}, c_{4,i}, c_{5,i}, c_{6,i}, \Delta t)$$

其中:

$$\varphi(t_i, c_{1,i}, c_{2,i}, c_{3,i}, c_{4,i}, c_{5,i}, c_{6,i}, \Delta t) = \sum_{i=1}^5 b_i K_i$$

$$K_i = F(t_i, c_{1,i}, c_{2,i}, c_{3,i}, c_{4,i}, c_{5,i}, c_{6,i})$$

$$K_i = F(t_i + \lambda_i \Delta t, c_{1,i} + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j, c_{2,i} +$$

$$\Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j, c_{3,i} + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j, c_{4,i} +$$

$$\Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j, c_{5,i} + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j, c_{6,i} +$$

$$\Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \mu_j K_j) \quad i = 2, \dots, 5,$$

b_i, λ_i, μ_j 均为常数.

3 太湖藻类生长参数确定

利用生态槽 06-03 ~ 06-07 的 1 组实测数据对模型进行参数率定,找出允许误差范围内的若干组参数,采用最小二乘法筛选出最优 1 组参数.再利用 06-14 ~ 06-22 的实验数据对确定的参数进行验证,以确保模型参数的可靠性.

3.1 太湖藻类生长模型参数率定

利用 06-03 ~ 06-07 连续测定的 5 组藻类及氮、磷营养盐的浓度进行参数调节使模型计算值与实测值的相对误差均小于 20%,得出 3 组参数值.采用最小二乘法筛选出最优的 1 组.假定 3 组参数的集合分别为 A^0 、 A^1 、 A^2 , $\varphi = \{A^0, A^1, A^2\}$, 则最优的 1 组参数需满足:

$$\begin{aligned} \|\delta\|_2^2 &= \sum_{i=1}^m \delta_i^2 = \sum_{i=1}^m [A^*(x_i) - y_i]^2 \\ &= \min_{A(x) \in \varphi} \sum_{i=1}^m [A(x_i) - y_i]^2 \end{aligned}$$

其中, $A(x_i)$ 为在某组参数下模型计算出的第 i 个计算值, y_i 是第 i 个实测值, m 为实测值个数.最终确定的藻类生长参数见表 2,计算和实测值的对比见图 3.

图 3 显示藻类及各种营养盐浓度的计算值均能较好地吻合实验测量值,除了无机磷浓度计算值与实测值的平均相对误差为 13.0% 外,其余平均相对

误差均在 10 % 以下。

表 2 藻类生长模型参数

Table 2 Parameters of algae growth model			
参数	数值	来 源	
K_N	氮的半饱和常数 $3 / \text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$	0.14	率定得出
K_P	磷的半饱和常数 $3 / \text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$	0.015	率定得出
K_{1C}	藻类在 $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时的生长率/d	2.0	率定得出
θ_{1C}		1.12	率定得出
K_I	光的半饱和常数 $3 / \text{kJ} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{d})^{-1}$	280	率定得出
K_{1R}	藻类的呼吸率/d	0.45	率定得出
θ_{1R}		1.11	率定得出
K_{1D}	藻类死亡率/d	0.2	率定得出
a_{PC}	磷-碳比	0.025	文献[8]
K_{23}	矿化率常数/d	0.08	率定得出
θ_{23}		1.05	率定得出
f_{D2}	溶解的有机磷份数	0.75	率定得出
f_{D3}	湖水中溶解无机磷份数	0.99	率定得出
a_{NC}	氮-碳比	0.25	文献[8]
K_{45}	矿化率常数/d	0.05	率定得出
θ_{45}		1.02	率定得出
f_{D4}	溶解的有机氮份数	0.85	率定得出
P_{NH_3}	偏氮系数	0.3	率定得出

3.2 太湖藻类生长模型参数验证

采用生态槽 06-14 ~ 06-22 的实测数据对模型参数进行验证,计算结果如图 4 所示。

验证结果显示,无机磷浓度计算值与实测值的平均相对误差为 18.5 %,其余平均相对误差均小于 15 %。

4 结语

本研究取太湖源水至实验室的生态槽中,在一定的温度、光照及营养盐的条件下动态模拟了生态槽中的藻类生长情况。同时应用 PHREEQC 建立了藻类生长模型,模型中考虑了藻类与温度、光照、营养盐的关系以及各种营养盐之间的转换。利用生态槽实验结果对所建模型进行了参数率定和验证,最终确定了藻类生长模型的各参数值。率定和验证结果显示计算值与实测值的最大相对误差为 18.5 %,平均相对误差小于 15 %,表明所建模型能较好地反映藻类动态变化的内部机制,在太湖藻类预测及藻类“水华”暴发预警系统中有良好的应用前景。

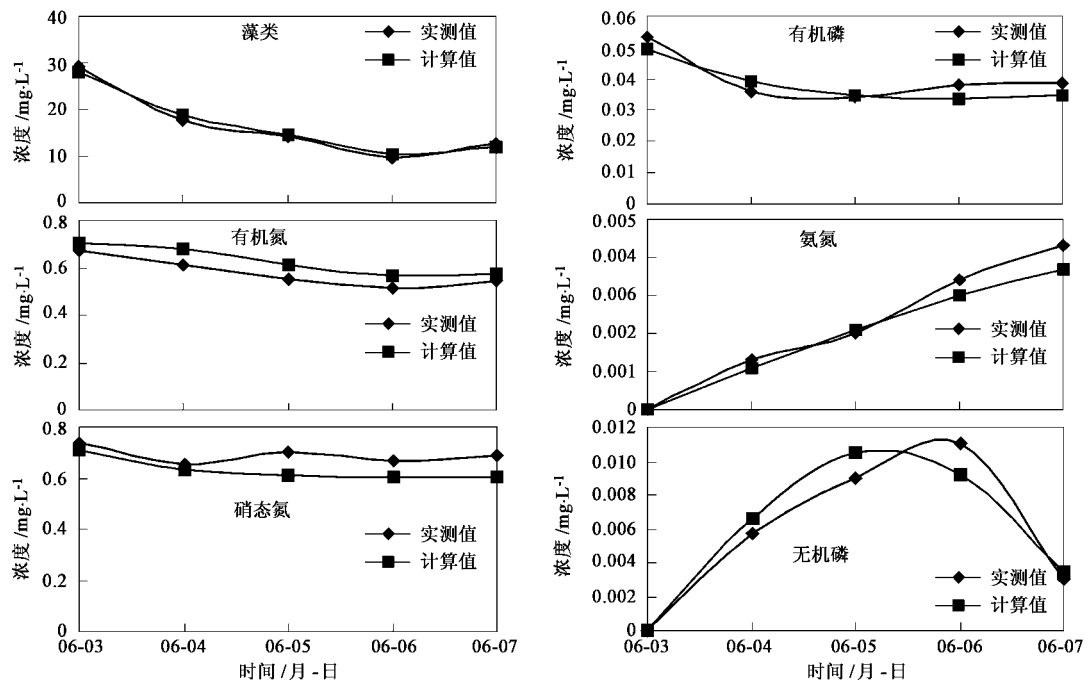


图 3 浓度计算值与实测值对比

Fig. 3 Comparison between calculated and measured concentrations

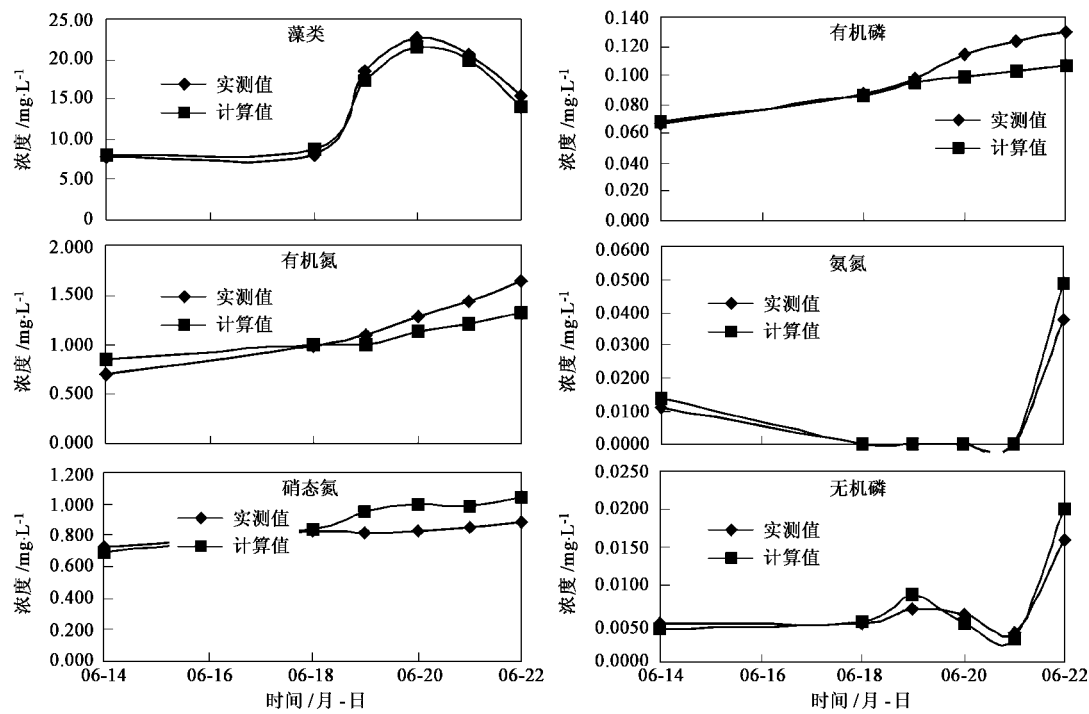


图 4 浓度计算值与实测值对比

Fig.4 Comparison between calculated and measured concentrations

参考文献：

[1] 陈宇炜. 西太湖北部夏季藻类种间关系的初步研究[J]. 湖泊科学, 1998, 10(4) : 35 ~ 40 .

[2] 陈宇炜. 太湖梅梁湾藻类及相关环境因子逐步回归统计和蓝藻水华的初步预测[J]. 湖泊科学, 2001, 13(1) : 63 ~ 71 .

[3] 张青田. 环境因子对赤潮藻类增殖及相关特性的影响[J]. 海洋湖沼通报, 2002, 1 : 79 ~ 84 .

[4] 刘元波. 湖泊藻类动态模拟[J]. 湖泊科学, 2000, 12(2) : 171 ~ 177 .

[5] 刘元波. 太湖梅梁湾藻类生态模拟与蓝藻水华治理对策分析[J]. 湖泊科学, 1998, 10(4) : 53 ~ 59 .

[6] 许秋瑾. 太湖藻类生长模型研究[J]. 湖泊科学, 2001, 13(2) : 149 ~ 157 .

[7] 黄祥飞. 湖泊生态调查观测与分析[M]. 北京 : 中国标准出版社, 1999 .

[8] 逢勇. 太湖地区大气-水环境的综合数值研究[M]. 北京 : 气象出版社, 1998 .

[9] Appelo C A J. Cation and proton exchange , pH variations , and carbonate reactions in a freshening aquifer[J]. Water Resources Research, 1994 , 30 : 2793 ~ 2805 .

[10] Appelo C A J. Some calculations on multicomponent transport with cation exchange in aquifers[J]. Ground Water, 1994 , 32 : 968 ~ 975 .

[11] Tebes-Steven C, Valocchi A J. Reactive transport simulation with equilibrium speciation and kinetic biodegradation and adsorption/ desorption reactions[A]. A Workshop on Subsurface Reactive Transport Modeling[C]. Washington: October 29- November 1 , 1997 .

[12] Parkhurst D L. Geochemical mole-balance modeling with uncertain data[J]. Water Resources Research, 1997 , 33(8) : 1957 ~ 1970 .

[13] Tebes-Stevens C, Valocchi A J, VanBriesen J M, Rittmann B E. Multicomponent transport with coupled geochemical and microbiological reactions —— model description and example simulations[J]. Journal of Hydrology, 1998 , 209 : 8 ~ 26 .

[14] Fehlberg E. Klassische Runge- Kutta Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit chrittweitem Kontrolle[J]. Computing, 1969 , 4 : 93 ~ 106 .

[15] Parkhurst D L, Appelo C A J. User' s guide to PHREEQC (version 2) —— A computer program for speciation, batch-reaction, one dimensional transport, and inverse geochemical calculations[R]. U. S. Geological Survey Water Resources Investigations Report 99 ~ 4259, 1998 .