

微生物介导的地下水生物地球化学过程数值模拟研究进展

戴 恒, 吴慧娴, 任婉立, 张翼宇, 文 章, 袁松虎

Advances in microbial-mediated numerical modeling of biogeochemical processes in groundwater

DAI Heng, WU Huixian, REN Wanli, ZHANG Yiyu, WEN Zhang, and YUAN Songhu

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202412026>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高放废物深地质处置地下水流数值模拟方法研究进展

Advances in groundwater numerical simulation in deep geological disposal of high-level radioactive waste

李露露, 周志超, 邵景力, 崔亚莉, 赵敬波 水文地质工程地质. 2021, 48(6): 13-23

地下水位波动带三氮迁移转化过程研究进展

Advances in researches on ammonia, nitrite and nitrate on migration and transformation in the groundwater level fluctuation zone

刘鑫, 左锐, 王金生, 何柱锟, 李桥 水文地质工程地质. 2021, 48(2): 27-36

高放废物深地质处置地下水数值模拟应用综述

Review of groundwater numerical simulation for deep geological disposal of high-level radioactive waste

李露露, 张秋兰, 李星宇, 张璜, 崔亚莉, 邵景力 水文地质工程地质. 2022, 49(2): 43-53

基于FEFLOW的三维土壤-地下水耦合铬污染数值模拟研究

Numerical simulation of three-dimensional soil-groundwater coupled chromium contamination based on FEFLOW

刘玲, 陈坚, 牛浩博, 李璐, 殷乐宜, 魏亚强 水文地质工程地质. 2022, 49(1): 164-174

地下水环境中的硫代砷研究进展

Advances in thioarsenic in groundwater systems

严克涛, 郭清海 水文地质工程地质. 2019, 46(6): 132-141

甘肃北山区域地下水流数值模拟研究

Numerical simulation of regional groundwater flow in the Beishan area of Gansu

曹潇元, 侯德义, 胡立堂 水文地质工程地质. 2020, 47(2): 9-16



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

DOI: 10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202412026

戴恒, 吴慧娴, 任婉立, 等. 微生物介导的地下水生物地球化学过程数值模拟研究进展 [J]. 水文地质工程地质, 2025, 52(3): 14-27.

DAI Heng, WU Huixian, REN Wanli, et al. Advances in microbial-mediated numerical modeling of biogeochemical processes in groundwater[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2025, 52(3): 14-27.

微生物介导的地下水生物地球化学过程数值模拟研究进展

戴 恒^{1,2}, 吴慧娴^{1,2}, 任婉立¹, 张翼宇¹, 文 章², 袁松虎^{1,2}

(1. 中国地质大学(武汉)地质微生物与环境全国重点实验室, 湖北 武汉 430074; 2. 中国地质大学(武汉)长江流域环境水科学湖北省重点实验室, 湖北 武汉 430078)

摘要: 地下水污染是全球性的环境问题, 严重威胁人类健康和生态环境。作为地下水生态系统的重要组成部分, 微生物通过其代谢反应参与多种生物地球化学过程, 控制着污染物的转化与迁移。数值模拟是定量描述和预测地下水污染物迁移转化行为的重要手段, 而理解和掌握微生物代谢过程的建模方法将有助于进一步提升对地下水中污染物运移行为的模拟和预测精度。鉴于此, 文章按照发展时间与应用尺度, 系统总结了微生物代谢活动模拟方法的发展进程, 重点探讨了新一代基因测序技术的进步对数值模拟研究的推动作用; 同时, 详细介绍了如何构建微生物代谢模型, 以定量描述其参与的生物地球化学过程, 并汇总了常用的微生物信息数据库和模拟软件; 最后指出, 当前微生物代谢模型的应用仍面临诸多挑战, 包括模型验证困难、参数适用性不足、数据获取难度大以及计算需求高等问题。未来研究需进一步深入探索微生物代谢机制, 优化建模方法, 完善适用于不同需求的参数和经验方程, 以提升模型的准确性和适用性; 同时, 还需着力解决模型构建中微生物相关数据的处理、计算精度与效率的问题。

关键词: 地下水污染; 数值模拟; 微生物代谢模型; 生物地球化学过程; 数据-模型整合

中图分类号: P641.3

文献标志码: A

文章编号: 1000-3665(2025)03-0014-14

Advances in microbial-mediated numerical modeling of biogeochemical processes in groundwater

DAI Heng^{1,2}, WU Huixian^{1,2}, REN Wanli¹, ZHANG Yiyu¹, WEN Zhang², YUAN Songhu^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Geomicrobiology and Environmental Changes, China University of Geosciences (Wuhan), Wuhan, Hubei 430074, China; 2. Hubei Key Laboratory of Yangtze Catchment Environmental Aquatic Science, China University of Geosciences (Wuhan), Wuhan, Hubei 430078, China)

Abstract: Groundwater contamination is a global environmental issue that seriously threatens human health and ecological environment. As an essential component of groundwater ecosystems, microorganisms are involved in a series of biogeochemical processes through their metabolic reactions, which control the transformation and transport of contaminants. Numerical simulation of the contaminants transport and transformation is an effective method to quantitatively describe and predict their behaviors. Understanding and handling the modeling of

收稿日期: 2024-12-11; 修订日期: 2025-03-27

投稿网址: www.swdkgcdz.com

基金项目: 国家自然科学基金优秀青年科学基金项目(42422208); 国家重点研发计划项目(2022YFC3702402)

第一作者: 戴恒(1987—), 男, 博士, 研究员, 主要从事生物地球化学模拟、地下水模型不确定性分析研究工作。E-mail: daiheng@cug.edu.cn

microbial metabolic processes can significantly improve the accuracy of simulation and prediction of contaminants behaviors in groundwater. Here, this review systematically summarizes the development process of microbial metabolic activities according to the development timeline and application scales, focusing on the advancement of next-generation gene sequencing technology to promote numerical simulation research. Meanwhile, this review analyzes how to construct microbial metabolism models to quantitatively describe the biogeochemical processes they are involved in, and summarizes the commonly used microbial information databases and simulation softwares. It is pointed out that the current application of microbial metabolism modeling still faces many challenges, including verification difficulty, low parameter applicability, data acquisition difficulty, and high computational demands. Future research should further explore microbial metabolic mechanisms, optimize microbial metabolic modeling methods, and improve parameters and empirical equations under different demands, to enhance the accuracy and applicability of models, as well as to solve the issues of microbial-related data processing and computational precision and efficiency in model establishment.

Keywords: groundwater contamination; numerical simulation; microbial metabolism modeling; biogeochemical process; model-data integration

地下水资源是关乎国计民生的重要自然资源^[1-3]。然而,相关研究显示,我国地下水污染态势正在加剧,其严峻程度远超预想^[4-5]。随着工业化和城市化的快速发展,农业化肥与农药超量施用,工业废水、生活污水随意排放,地下水资源正面临着广泛且严峻的污染威胁。地下水污染的影响极为深远,不单对水生生态系统造成破坏,还直接危及人类生产生活。此外,地下水修复通常需要投入大量人力物力,且治理周期较长,这使得地下水污染问题更加复杂且具有挑战性^[6-8]。数值模拟是地下水污染防治的重要手段之一,通过对地下水中污染物的迁移、扩散及时空转化过程进行量化,可深入探究污染物的迁移行为特征及控制因素。相较现场长序列监测,数值模拟能够节省时间与成本,不受点位限制和尺度效应影响,并提供更为系统完备的认知^[9-11]。因此,数值模拟方法在污染场地评估、地下水资源开发利用及污染修复中被广泛运用,为深入理解和解决地下水污染问题提供了有力的技术支撑。

20 世纪初至中期,研究者在开展地下水的常规理化指标测试时,逐步发现地下水中广泛存在细菌及其他微生物。这些源自地表渗滤、地下生态系统的内生微生物以及污染物引入的外源微生物证实了地下水并不是没有生命存在的环境,其中充满了各种活跃的微生物群落。这些发现为后续地下水中微生物的各项研究提供了坚实的基础^[12-13]。20 世纪中后期,放射性同位素技术的发展推动了对微生物代谢流程的深入探究,揭示了地下水中微生物具有分解有机物及参与碳、氮、硫等元素循环的关键功能^[14-16]。20 世纪

末,伴随分子生物学技术的蓬勃发展,聚合酶链式反应(polymerase chain reaction, PCR)、基因测序等方法被引入地下水微生物的研究^[17-18],诸多极端环境下微生物(如嗜热菌^[19]、嗜盐菌^[20]等)的动态特征及其生存机制得以揭示,地下水微生物在污染物(如石油^[21-22]、重金属^[23-24]、氯代烃^[25]等)生物降解过程中的核心作用得以发现^[26]。21 世纪初迄今,先进的分子生物学技术,如高通量测序、宏基因组学、宏转录组学和代谢组学被用以探究地下水微生物群落的潜在代谢功能,地下水微生物群落之间的相互作用以及对于环境的适应机制得到广泛研究。一些关键功能微生物,如硫酸还原菌、铁还原菌、甲烷生成古菌等被精准识别^[27-29]。随着生物信息技术的快速发展,微生物在地下水中扮演的角色和起到的作用越发明朗。这些认知对于地下水污染治理、地质能源开发和生态环境保护等具有重要意义。

在早期的地下水反应性溶质运移模型中,微生物介导的生物地球化学过程虽受关注,但与反应过程直接关联的微生物信息却被简单概化处理,即假定微生物在地下水环境中均匀分布,且其代谢功能在不同环境中均一表达^[30]。这类模型通常借助化学动力学方法(如一级动力学方程)来计算生地化反应速率。实际上,地下水中溶质运移行为与微生物的群落动态是相互影响的^[31]。地下水中溶质浓度的空间分布受到微生物群落控制,微生物群落状态也随溶质发生时空上的变化,由此,考虑生物量的化学动力学方法应运而生^[32-33]。相较于传统的化学动力学方法,以微生物宏基因信息(即特定环境中全部微生物的总 DNA)为基

础的微生物代谢建模方法在系统生物学和环境生态学等领域已得到广泛应用,如,基因组学数据定义了生物体的代谢潜力;流平衡分析(flux balance analysis, FBA)等方法能够预测最优反应路径和速率,且这些反应路径和速率会随环境的改变而变化^[34-36]。在此基础上,研究者将微生物代谢建模嵌入反应性溶质运移模型中,不仅模拟和预测微生物与地下水环境的相互作用,同时从微观和宏观的视角阐释地下水污染物的运移与转化规律。近期研究进一步指出,相较于微生物的生物量,控制微生物代谢功能的遗传物质(即功能遗传物质)更能准确反映其代谢特征。据此,Reed等^[37]提出了将生化反应速率与动态变化的基因丰度相结合的基因中心方法,证实了组学数据(如基因组学、转录组学、蛋白质组学和代谢组学等)能够作为指示代谢过程的生物学标志物。通过利用基因、酶、mRNA在内的遗传物质作为微生物群落的代替,对细胞内代谢过程进行模拟,并将基于基因信息的反应性溶质运移模型(reactive transport model, RTM)预测结果与观测到的微生物活性指标(如蛋白质组学或转录组学)加以比对,为理解微生物代谢过程提供了全新的视角和见解。

目前,虽然研究者对地下水中污染物的生物地球化学过程中微生物的作用有了一定的研究和认识,但现有的地下水微生物相关研究大多呈定性态势。尽管随着技术的进步,微生物代谢模型的构建方法不断优化,模型的预测准确性和实用性得到提高,但鲜见将先进的生物学信息耦合至生物地球化学反应的数值模型研究。或者说如何更准确地描述这些作用并将其与地下水溶质运移模型相耦合仍是一个挑战。未来的发展趋势预计将集中在进一步提高模型预测精度和效率,开发新算法工具增强模型功能和适用性,以推进微生物代谢模型在地下水环境中的应用。

1 微生物在地下水生物地球化学过程中扮演的角色

微生物是地下水生态系统中的重要组成部分,微生物降解作用对地下水环境中各种化学物质的迁移转化有着重要的影响^[38]。Magnabosco等^[39]、张怀胜等^[40]在2018年对地下环境中的微生物多样性进行了估算,结果显示,深层地下生物圈含有 $2 \times 10^{29} \sim 6 \times 10^{29}$ 个原核生物,占地球上总量的12%~20%。微生物群落的功能与地下水生态系统中的各种过程具有强相关性,多种多样的地下水微生物群落参与了地下水环

境中包括有机物降解、硝酸盐转化、重金属氧化还原等各种元素的循环转化过程,如图1所示^[41-46]。例如,地下水环境中碳循环包括有机物降解、生物固碳、产甲烷等过程,其中微生物介导的有机物降解过程是碳循环的重要组成部分^[41],微生物(主要是异养微生物)将有机物中的碳元素(底物)作为生长的能量来源,通过异养呼吸作用吸收利用有机物并将其转化为简单的无机物,同时完成自身生长^[42,47]。在氮循环过程中,反硝化细菌如施氏假单胞菌(*Pseudomonas stutzeri*)、脱氮副球菌(*Paracoccus denitrificans*)、反硝化硫杆菌(*Thiobacillus denitrificans*)等以及硝化细菌如亚硝酸盐氧化菌(*Nitrobacter winogradskyi*)、氨氧化菌(*Nitrosomonas*)等是地下环境中氮循环过程的主要参与者,这些菌群分别介导如厌氧氨氧化、异化还原为氨等不同的反应过程,影响地下水中氮元素存在的形态与浓度^[48]。在地下水环境砷的迁移转化过程中,有机质提供碳源,由异化砷酸盐还原菌如砷嗜硫螺旋菌(*Sulfurospirillum arsenophilum*)、巴氏硫螺旋菌(*Sulfurospirillum barnesii*)、芽孢杆菌(*Bacillus*)等,通过异化砷酸盐还原作用改变地下水中砷的浓度和形态^[49]。除了这些独立的元素循环作用以外,不同化学元素的循环之间也有相互影响,例如微生物介导下的铁铵氧化过程不仅能够发生Fe(III)的还原,也会使得吸附在铁氧化物表面的砷释放,影响地下水中砷的存在形态^[46]。

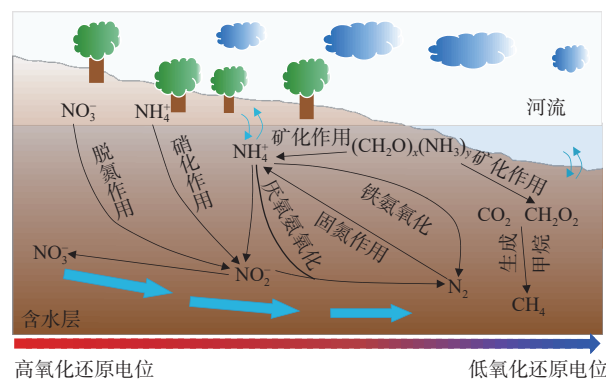


图1 地下水环境中主要微生物功能分区(据文献[41]修改)

Fig. 1 Different ecological niches in groundwater (modified after Ref. [41])

地下水数值模拟中,RTM常用于对各种化学元素在地下水中的迁移转化行为进行描述和预测,其控制方程包括对流项、弥散项以及源汇项三个主要部分,如式(1)所示^[38]。对流和弥散分别描述溶质在多孔介质中所受的地下水流作用和机械弥散、分子扩散作用,受地下水流、溶质本身性质及多孔介质性质的共同影响。源汇项描述导致地下水中溶质变化的全

部过程,如生物地球化学反应、蒸散发、大气沉降等。其中,由微生物介导的生物地球化学过程的反应速率是源汇项的重要部分。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) - \nabla \cdot (uC) + R \quad (1)$$

式中: C ——溶质(即化学物质)浓度/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$);

D ——溶质的弥散系数张量/($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$);

u ——地下水实际运动速率/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$);

R ——源汇项/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$);

t ——时间/s。

对复杂生物地球化学过程建立准确的数学模型是十分困难的,这主要是因为微生物群落动态的复杂性及其与环境因素的相互作用。目前常用来模拟生物降解过程的模型有一阶动力学模型和 Monod 方法等。这些方法能简化复杂的生物地球化学过程,如将微生物视为无处不在的反应物或催化剂,忽略了微生物状态对其代谢功能的影响、环境因素的作用、微生物的非均质分布以及微生物自身的运动^[48,50]。然而,正如 Groffman 等^[51]在 2004 年对不同流域的水文与氮动态间关系的研究中所指出的,氮污染来源和形式的差异可能会影响流域范围内氮的微生物转化;Reisinger 等^[48]在对城市流域中氮循环过程的研究中也发现,水生生态系统中不同含氮物质的转化主要受到微生物群落代谢过程的调控。这些常用方法虽然能够提高模型的计算效率,但精确度有限,无法精准描述直接影响代谢反应的微生物群落动态以及细胞内过程。因此,以往对污染物迁移转化过程中微生物代谢作用进行的简化处理已经不能满足当前对模型高精度的需求,需要开发能够更加形象、具体、精确的数值模拟方法来预测地下水中微生物及其代谢功能的作用,从而建立更加精确的地下水反应性溶质运移模型。

2 微生物代谢建模方法

在地下水数值模拟研究中,对微生物代谢过程的建模已取得了一定程度的理解与应用。随着计算方法以及新一代测序技术的发展,以及对微生物在生物地球化学过程中重要作用的理解不断加深,建模过程从简单的经验公式逐渐发展到关注单个微生物及微生物群落动态的微观层面,对微生物群落的组成、功能和代谢过程的研究进入了一个新的阶段^[52-53]。

2.1 传统化学动力学建模

长久以来,微生物的代谢过程被普遍认为遵循一级动力学衰减规律。在模型建立过程中,并没有明确

区分参与代谢反应的微生物种类,而是聚焦于对化学动力学的描述,将所有的微生物作用视为一个整体的影响因素^[30,54-55]。此时反应速率被描述为:

$$r_k = -\frac{\partial C}{\partial t} = \lambda_k C \quad (2)$$

式中: r_k ——化学物质浓度随时间变化的速率/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$);

λ_k ——化学反应的速率系数,代表含水层中所有相关微生物代谢反应的总和/ s^{-1} ;

C ——微生物代谢过程中相关化学物质的浓度/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$);

t ——时间/s。

在模型中,微生物被视为化学反应中的催化剂,即在稳态情况下,当底物受到限制时,整个微生物群落被认为是影响生物地球化学反应的一个静态稳定因素。控制各种化学反应的微生物群落普遍存在,并能够适应不断变化的环境条件^[56]。这种方法又被称为“没有微生物的模型”,模型中只需要一个参数 λ 来模拟生物降解过程^[30]。

然而,含水层中对流、扩散、吸附等过程和环境条件复杂多变^[44],微生物的动态变化也难以预测。仅通过单一参数 λ 表征这些综合效应,不但会使得模型结果的精过度度依赖该参数的准确性,还可能因过度简化而忽略关键环境变量的影响^[54,56]。

2.2 微生物生物量尺度建模

将微生物群落视为动态变化参数,考虑微生物群落在各种因素影响下的变化并将其加入模型中,即为微生物生物量尺度模型。生物量尺度建模方法由一组描述特定微生物物种代谢过程的常微分方程组成,包括底物消耗、微生物生长和代谢产物产生,如图 2 所示^[56-58]。通过将微生物的生物量变化构建为底物和代谢物浓度的函数,对这些变量进行预测。Monod 模型和 Michaelis-Menten 动力学(米氏动力学)是最经典的生物量尺度建模方法^[54],它们分别使用微生物和化学物质的底物浓度和特征常数来模拟微生物生物量的生长速率和代谢反应速率,控制方程如下^[59]:

$$\mu = \frac{\mu_{\max} S}{K_s + S} \quad (3)$$

式中: μ ——微生物的比增长速率,即单位生物量的增长速率/ s^{-1} ;

μ_{\max} ——微生物最大比增长速率/ s^{-1} ;

K_s ——半饱和常数,是微生物比增长速率为最大比增长速率值一半时的底物浓度/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$);

S ——底物浓度/($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$)。

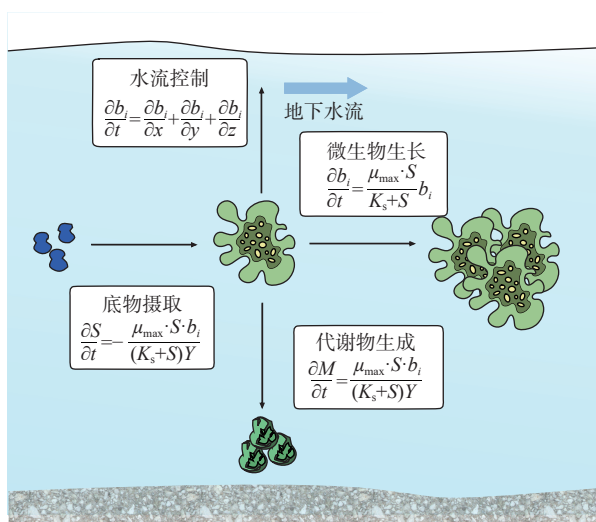


图 2 地下水环境中微生物尺度模型 (据文献 [56] 修改)

Fig. 2 Biomass scale modeling approaches in groundwater environment (modified after Ref. [56])

生物量尺度模型是在培养基中无抑制剂存在的情况下提出的,描述了不同生物学过程中的动力学特性,在实际应用中,这些方程可以帮助理解和预测生物系统在不同环境条件下的行为。此时,微生物的生物量不但与其自身的生长与衰减相关,还和代谢反应的化学计量相关。

真实地下水环境中,其他影响生物量动态的因素如关键酶活性的丧失、能量需求、混合培养中的代谢模式以及代谢中间产物的积累和消失也不可忽视^[56]。为了更准确地反映这些复杂因素,研究者们通常使用 Monod/Michaelis-Menten 动力学模型系列,即通过在传统 Monod/Michaelis-Menten 模型的基础上引入与不同过程和作用相关的其他参数,来描述环境条件对生物降解的约束和多种底物的相互抑制过程的能力。例如在式(3)的基础上,考虑到代谢过程中底物的非单一性,通过在模型中引入一个底物限制项,可以反映出多级反应,即多底物的 Monod 动力学模型^[54]。

以生物量作为微生物群落及其相关作用的代表可以描述代谢底物和代谢产物的变化,但模型中忽略了细胞内过程。细胞内基因表达、酶活性调控等过程是决定微生物代谢活动的关键,例如基因通过转录和翻译过程决定酶的合成,而酶活性又在细胞内信号通路的调控下,影响代谢反应的速率和方向,从而使得生物量尺度模型对复杂微生物动力学过程的模拟精度和预测能力受到限制(见本文 2.4 内容的介绍)。如地下水环境中三氯乙烯(trichloroethylene, TCE)及其他含氯烯烃类物质的脱氯途径主要包括微生物介导下

的还原脱氯、氧化脱氯以及共代谢脱氯。这些脱氯过程在地下水某些区域中可能同时发生,每种降解过程受到不同微生物中不同功能遗传物质的调控,降解产物也不尽相同,构成了 TCE 微生物降解的复杂代谢降解通路网络,难以仅根据不同生物种类对不同降解反应进行划分,使得对 TCE 降解反应动力学过程模拟变得十分困难^[60]。因此,为了更深入地模拟水生生态系统中的微生物动力学,需要进一步的建模方法。

2.3 考虑热力学条件的建模

微生物在代谢反应中会利用多种氧化剂,由于不同氧化还原反应提供的能量不同,对氧化剂的利用顺序也不同。研究表明,微生物控制了地下水环境中的氧化还原分带现象^[61]。例如,当有机污染物释放到地下时,会引发微生物介导的各种氧化还原反应,有机物被认定为提供能量的底物,也就是氧化还原反应规则中所定义电子供体,而各种电子受体如 O_2 、 NO_3^- 、 MnO_2 、 $Fe(OH)_3$ 等,则通过各种终端电子受体过程(terminal electron acceptor processes, TEAPs),包括有氧呼吸、反硝化、锰还原、铁还原和硫酸盐还原等,参与有机污染物的降解^[62-65]。由于不同的 TEAPs 释放的能量存在差异,而微生物倾向于选择能量释放较高的反应路径,因此,某些电子受体被优先利用,作为氧化还原反应的优先参与者,其他电子受体则在前一种反应发生后才开始进行,由此形成了地下水环境中的氧化还原分带,如图 3 所示^[64]。相反地,环境中的氧化还原条件也控制了微生物代谢反应的类型和特定的微生物群落结构。总体而言,微生物的代谢活动不仅受到底物和电子受体的限制,还受能量限制的影响,而能量限制又取决于底物和反应产物的浓度。

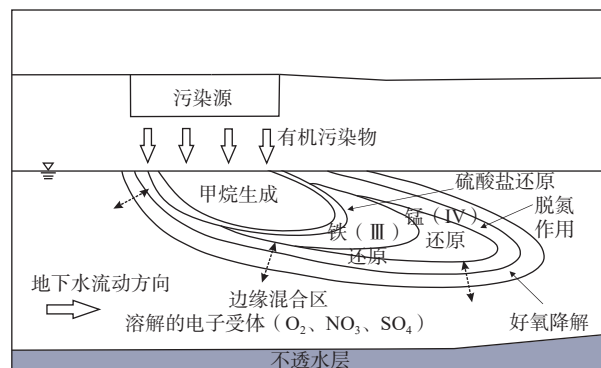


图 3 地下水氧化还原分带概念模型 (据文献 [64] 修改)

Fig. 3 Conceptual model for groundwater redox zonation (modified after Ref.[64])

考虑到不同代谢过程产生的能量对微生物生长

有不同程度的限制, Rolfe 等^[61]在 2008 年提出一种使用 TEAPs 的反应速率代替氧化还原物质浓度变化来描述氧化还原带时空分布的方法,开发了名为 Kin_REDOX 的动力学模型。该模型中加入了抑制过程来描述不同代谢反应顺序活跃的顺序。利用 Kin_REDOX 的动力学模型, Rolfe 等分别模拟了批实验(零维)、二维实验和实际场地中的有机化合物溶解过程,证实了热力学限制条件在描述和量化复杂的生物地球化学过程的必要性。在其他微生物能量有限的环境,如海洋沉积环境中, Bradley 等^[66]的研究表明,同样要考虑微生物通过代谢反应来获取维持其活性所需能量的需求,而不能仅考虑底物的实际浓度以确保它们能在能量稀缺的环境中生存下来。

2.4 微生物基因尺度建模

微生物基因尺度的建模方法建立在遗传信息的基础上,通过捕捉系统中特定基因的动态行为,将基因、酶等遗传物质作为微生物量的替代。这种方法不依赖于对包含遗传物质的特定微生物物种的识别,而是基于特定的功能性遗传物质对微生物进行分组,模拟不同功能组随时间的变化。在微生物基因尺度模型中,微生物的遗传物质作为不同代谢反应的真正控制者,决定了生物地球化学反应的速率,而这些反应过程的进行也同时影响着遗传物质的动态变化^[67]。

Reed 等^[37]首次提出了一种基于基因为中心的建模方法,用于模拟阿拉伯海氧最小区中的氮动力学和硫循环。该模型由 10 种代谢途径组成,并使用相关基因作为微生物的替代,将反应速率与功能基因丰度的动态变化联系起来,从而预测对应代谢反应的速率。

基因中心方法中,功能基因丰度的变化速率被描述为:

$$\frac{\partial \Gamma_j}{\partial t} = \Gamma_j \cdot \mu_j \cdot F_T \prod_s \frac{C_s}{K_s + C_s} \cdot \prod_x \frac{K_x}{K_x + C_x} - \lambda \Gamma_j \quad (4)$$

式中: Γ_j ——功能基因 j 的丰度/(genes·L⁻¹);

μ_j ——功能基因 j 的增长速率/s⁻¹;

F_T ——反应热力学因子;

C_s 、 C_x ——反应物和抑制剂的浓度/(mol·L⁻¹);

K_s 、 K_x ——反应物和抑制剂的半饱和常数/(mol·L⁻¹);

λ ——基因的死亡率常数/s⁻¹。

方程左侧项 $\frac{\partial \Gamma_j}{\partial t}$ 代表基因产生率 r_j , $\prod_x \frac{K_x}{K_x + C_x}$ 为

抑制项,代表所有潜在抑制剂的抑制作用;反应物质浓度的变化速率,即相关代谢反应速率(R_s)可以被刻画为:

$$R_s = \sum_j \left(\frac{\gamma_{js}}{|\gamma_{je}|} \cdot \frac{r_j}{n_j} \cdot Y \right) \quad (5)$$

式中: γ_{js} ——与功能基因 j 有关的代谢反应物的化学计量系数;

γ_{je} ——代谢中电子供体的化学计量系数;

n_j ——含有该基因的细胞单位重量中功能基因 j 的数量;

Y ——微生物生物量生产率,是自由能产量的函数。

在该模型中,微生物的生长依赖于底物和养分的可利用性,并使用修正的 Monod 方程来构建遗传物质与代谢物浓度的函数,而 F_T 说明了可用于驱动代谢的化学能。

除功能基因外,其他许多遗传物质也可作为微生物生物量的替代。如 Louca 等^[68]通过将 mRNAs 的动态模拟纳入原有的基因中心模型以模拟季节性海洋低氧区中氮和硫的动态,对模型进行了扩展。而 Li 等^[53]认为,功能酶比功能基因能更直接催化生物地球化学过程,因此提出一个基于功能酶丰度动态变化的模型,并以反硝化作用为例,证明了模型的有效性。

2.5 微生物代谢网络建模

根据微生物基因信息进行的代谢网络分析是深入理解微生物代谢机制的有效方法之一。微生物的代谢网络由许多不同的代谢通路组成,代谢通路之间相互交织,共同作用于能量和物质的转化。基因组规模的代谢模型(genome-scale models, GEMs)是生物有机体中发生的一组生化反应的数学表示,可以指代整个生物体、特定组织、一组细胞,甚至整个环境^[69-70]。

GEMs 已被证明是理解代谢过程复杂性的一种有效方法,并已被证明可以应用于广泛的生物现象,包括:高通量数据的背景化、代谢工程的指导、指导假设驱动的发现、多物种关系的询问和网络属性发现^[71]。GEMs 的构建基于基因注释和功能,代谢物、反应、酶及其相互作用的实验数据和信息^[72-73],通过关注代谢过程的机制,将反应通量描述为相关代谢物和微生物群落的量化指标的函数^[74-76]。GEMs 的核心在于化学计量学代谢网络(stoichiometric metabolic networks, SMN)建模和 FBA 方法^[77],它们可用于量化由化合物形成的网络中的反应速率和细胞代谢中的化学反应序列。

FBA 方法是一种在代谢网络中模拟细胞生长和代谢的数学方法,用于研究和预测生物系统内代谢网络的行为。特别是在微生物、细胞以及其他生物化学过程的背景下,具有重要的应用价值^[78-79]。

FBA 方法基于生物信息学技术获得的代谢途径和反应网络数据,通过线性规划方法求解网络内代谢通量的分布^[34]。在 FBA 方法中,首先通过代谢建模对细胞代谢进行简化抽象,将其描绘为一个相互交织的生化反应网络,而后假设微生物代谢网络会在外界环

境条件下为达到代谢目标进行自我调整和优化,进而达到稳定状态,最终将环境限制条件下的代谢反应速率分布转化为有限制条件下的最优化数学问题(图 4)^[79]。这种方法显著减少了对难以获得的动力学参数的依赖,从而消除了部分经验主义,简化了模型的建立。

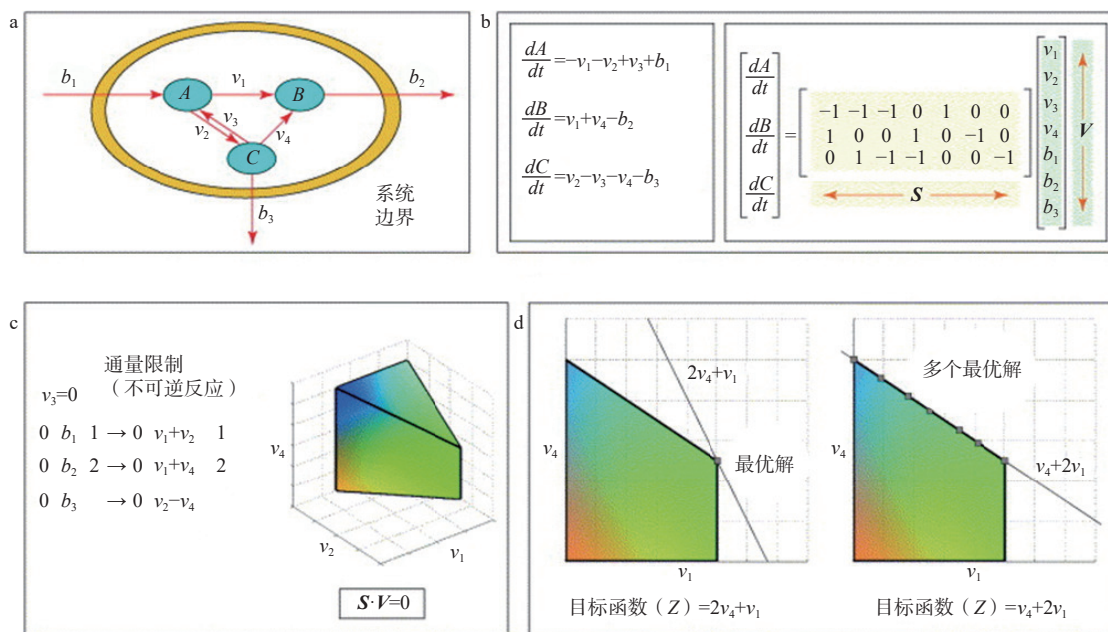


图 4 流平衡分析方法示意图(据文献[78]修改)

Fig. 4 Schematic diagram of the FBA method (modified after Ref. [78])

然而,传统的 FBA 方法只适用于稳态情况,并且受到基底吸收率的限制,影响了 GEMs 的预测准确性。为了克服这些限制,基于 FBA 原理,研究者后续还开发了其他流平衡分析算法,如纳入转录调控 rFBA(regulatory FBA)^[80]、考虑代谢物稀释的 MD-FBA (metabolic dilution FBA)^[81]、考虑酶动力学模拟动态生物过程的 DFBA(dynamic FBA)^[36] 和涉及反应热力学的 cFBA(community FBA)^[82] 等。

代谢模型不仅可以深化人们对物种之间代谢相互作用的理解,也促进了代谢组学、蛋白质组学和转录组学数据的动态分析和定量整合的实现^[83],已成为理解细胞代谢机制、描述表征细胞表型、设计目标特性的突变菌株以及评估遗传干预和环境扰动对细胞代谢的影响的重要工具^[84]。

3 生物地球化学过程模拟工具

目前已经开发了各种数据库、分析平台或商业软件,用于模拟地下水中微生物参与的生物地球化学过程。包括微生物基因信息平台:NCBI 数据库、MODEL

SEED 数据库、KBase 工作台、BRENDA、KEGG 等,以及数值模拟工具如 PFLOTRAN、MATLAB、COMSOL、FLUENT 等。这些工具已在以往研究中被广泛应用。本文简述了部分常用的分析工具与数值模拟工具。数据库网址及特征见表 1。

表 1 微生物基因信息平台的基本信息

Table 1 Basic information of the microbial gene information platform

平台	网站	优势与限制
NCBI	https://www.ncbi.nlm.nih.gov	全面性、权威性、更新快、工具丰富
MODEL SEED	https://modelseed.org	专注于代谢数据集成、完整的建模工具集成化平台、
KBase	http://kbase.us	用户友好界面、云计算资源、用户协作

3.1 微生物基因信息平台

(1) NCBI 数据库

NCBI(National Center for Biotechnology Informa-

tion, 美国国家生物技术信息中心)是一个提供生物医学和基因组学数据库及工具的公共数据库,是目前国际最大的生物信息存储库之一^[85-86]。数据库收录了包括核酸序列、蛋白质序列、基因组数据、基因表达数据、遗传变异、生物路径、基因功能以及文献引用等广泛的科学数据,还有许多重要的公共数据库如 GenBank(核酸序列数据库)、PubMed(生物医学文献搜索引擎)、ClinVar(临床遗传变异数据库)和 dbSNP(单核苷酸多态性数据库)等。此外,NCBI 还提供了一系列的分析工具和资源,如 BLAST(用于序列比对)、RefSeq(参考序列数据库)等,用户可以通过平台访问并利用这些生物信息和工具来开展相关的科学研究^[87]。

(2) MODEL SEED 数据库

MODEL SEED 数据库是由美国能源联合基因组研究所开发的一个先进的系统生物学数据库和建模平台,属于 SEED(Systems Ecology and Engineering Database, 系统生态学与工程数据库)项目的一部分,MODEL SEED 提供了一个用于构建和分析基于 SEED 数据库信息的微生物代谢模型的平台。MODEL SEED 提供了全面的生物反应、化合物和基因组数据库,支持用户构建和分析微生物生态系统^[88]。数据库集成了多种微生物信息学工具和资源,帮助用户分析微生物的生长和代谢活动,预测生长条件和基因表达模式,理解微生物在不同环境条件下的功能和动态变化,是生物技术和环境科学应用研究领域的重要资源平台。

(3) KBase 工作台

KBase 工作台(Knowledge Bank of Bioenergy and Biology, 生物能源与生物学知识库)是由美国能源部资助的一个大型数据科学平台,是推动生物能源和生物学研究的国家级科学数据库和分析平台^[89]。KBase 平台整合了大量的生物数据资源,包括基因组序列、转录组数据、代谢途径、环境数据等。用户可以在平台中上传自己的数据来丰富数据库,同时可以下载并使用其他用户上传的数据及相关的工作流程和结论。KBase 不但有多样的数据分析功能,同时提供了各种分析工具的使用教程,极大方便了用户后续进行代谢模型的建立。用户可以通过在 KBase 中构建相关的生物代谢模型,进行生物过程的模拟来预测生物体在不同条件下的行为等。

3.2 数值模拟工具

(1) PFLOTRAN

PFLOTRAN 是由美国能源部国家核安全管理局支持开发的一款高性能计算模拟软件,可以用于模拟

多相流和反应性溶质在多孔介质中的传输过程。其核心功能包括对多相流、热量和质量传递以及多组分化学反应的模拟,同时能够处理复杂的多物理场问题。PFLOTRAN 采用模块化设计,用户可以灵活选择并组合所需要的物理和化学过程^[90-91]。虽然 PFLOTRAN 本身主要关注非生物地球化学过程,但它也提供了一些功能来耦合微生物代谢模型,尤其是处理生物地球化学过程,如生物降解和生物修复等。用户可以编写自定义代码、利用并行计算资源来定义微生物反应、设置微生物生长动力学、初始化微生物种群、配置环境条件等,耦合传输过程与微生物代谢模型^[92]。

(2) MATLAB

MATLAB 是一种常用的高性能自编代码数学模型求解器,广泛应用于工程、科学研究、数学建模和数据分析。在 MATLAB 中,不但有相关的矩阵运算、数据可视化、算法开发以及对各种工程和科学应用的内置函数支持,还提供了各种工具来应用于多域模拟和基于模型的设计^[93]。

COBRA(constraint-based reconstruction and analysis, 基于约束的重构和分析方法)工具箱是 MATLAB 中的附加工具之一,专门用于系统生物学和代谢网络的研究^[94]。COBRA 工具箱提供了一套丰富的函数和工具,用于重建代谢网络、分析代谢通量和探索生物系统的潜在功能^[94]。用户可以利用工具箱进行流平衡分析、通量变分分析、代谢途径分析和网络稳健性分析等。COBRA 工具箱支持从基因组数据到代谢网络的重建,使得研究者能够预测和优化生物系统的代谢行为。

(3) COMSOL

COMSOL Multiphysics 是一个基于有限元方法的数值模拟软件,广泛应用于工程和科学领域。它能够模拟各种物理场问题,包括流体动力学、热传递、电磁学、声学、结构力学以及化学反应工程等。COMSOL 的一个显著特点是其多物理场耦合能力,允许用户模拟不同物理现象之间的相互作用^[95-96]。

通过 COMSOL 中的生化传输模块,可以进行微生物生长、代谢反应、物质传输和反应-扩散过程的模拟,用户可以定义微生物代谢网络,包括底物消耗、能量产生和代谢产物的生成,以及这些过程如何受到环境条件(如温度、pH 值、氧气浓度等)的影响。通过 COMSOL 的可视化和后处理工具,用户可以直观地展示模拟结果,包括微生物分布、代谢通量、浓度分布和反应速率等。

(4) FLUENT

FLUENT 是 ANSYS 公司开发的一款强大的计算流体动力学软件, 广泛应用于工程和科学研究领域, 用于模拟流体流动、热传递、质量传递和化学反应等过程, 且具有一定的灵活性和可扩展性^[97]。在 FLUENT 中, 用户可以通过用户定义函数(user define function, UDF)模块进行函数的定义^[98]。在 UDF 中定义微生物的生长动力学, 包括 Monod 模型、Michaelis-Menten 动力学或其他更复杂的模型, 将微生物代谢过程, 如底物消耗、能量产生和代谢产物生成等直接嵌入到流体动力学模型中, 实现微生物代谢过程与流体环境之间的耦合。FLUENT 的后处理工具还可以帮助用户可视化微生物的生长和代谢活动, 以及它们在流体环境中的分布。

4 结论与展望

微生物在地下水环境的生物地球化学过程中发挥着关键作用, 数学模型工具在深入理解微生物群落的组成、功能和代谢行为方面有显著优势, 对微生物代谢过程进行建模有助于进一步揭示微生物对地下水中污染物迁移转化的控制机制, 为污染物的行为演化与预测提供重要参考。

近年来, 基因组学、代谢组学、转录组学等组学技术的发展, 推动了多种微生物代谢模型的开发与应用。这些模型因其研究对象和应用场景的差异而具有不同的适用性。目前, 大多数的微生物代谢模型都是基于米氏方程开发的, 方程中参数相对易于获取, 使得其虽然应用更加广泛, 但也导致了模型结果的高度不确定性, 难以满足高精度建模的需求。相比之下, 考虑微生物细胞内动态变化的复杂模型尽管在一定程度上能够提升模型的预测精度, 但微生物基因信息获取成本高、参数取值确定难、实际场地应用难度大也使其应用发展受到限制。因此, 对于建模方法的选取需要综合多种因素, 如同时发生的各种生物地球化学过程间的相互作用、模型参数值的获取、不同场地适用条件、不同区域尺度范围的建模精度要求等。多样化的微生物信息数据库和相关模拟软件的建立与开发, 极大促进了微生物建模方法的快速发展, 为地下水污染治理提供了丰富且高效的科学工具。

结合当前地下水生物地球化学建模的发展趋势, 未来研究应从以下几个方面继续推进:

(1) 越来越多的新工具与微生物数据使得数值模型涵盖了微观到宏观等多个尺度, 深化了对微生物群

落动态以及微生物内过程的研究。尽管如此, 数据获取、参数适用性、模型验证和计算需求仍是当前面临的挑战。未来研究需要对不同生态系统模型选取与参数确定程序化, 解决大规模应用中的数据处理和计算问题。

(2) 对于开放的生态系统, 复杂场地的水文地质条件不同导致模型输入条件的不确定性(参数不确定和过程不确定), 进而导致模型输出的不确定性, 因此需要同时开发更多样的地下水调查方法, 获取更多、更准确的数据, 提高模型对不同场地的适用性和精确度。

(3) 基于微生物信息的生物地球化学过程模拟, 其最终目的是对地下水中溶质运移模型的优化。如何在保证模型准确性的同时, 简化对生物地球化学反应过程的计算负担与应用限制, 使其成为更加方便利用的工具, 进而得到进一步的推广使用, 也是未来模拟研究中的重点。

参考文献 (References) :

- [1] 中华人民共和国水利部. 中国水资源公报 2023[R]. 北京: 中国水利水电出版社, 2024. [Ministry of Water Resources of the People's Republic of China. China water resources bulletin 2023[R]. Beijing: China Water Power Press, 2024. (in Chinese)]
- [2] 王熹, 王湛, 杨文涛, 等. 中国水资源现状及其未来发展方向展望[J]. 环境工程, 2014, 32(7): 1-5. [WANG Xi, WANG Zhan, YANG Wentao, et al. Shortage of water resources in China and countermeasures[J]. Environmental Engineering, 2014, 32(7): 1-5. (in Chinese with English abstract)]
- [3] 韩勇, 杨倩楠, 李占斌, 等. 近 20 年中国供用水结构变化与政策调控[J]. 水利规划与设计, 2022(3): 5-10. [HAN Yong, YANG Qiannan, LI Zhanbin, et al. Changes of water supply and consumption structure and policy regulation in China in recent 20 years[J]. Water Resources Planning and Design, 2022(3): 5-10. (in Chinese with English abstract)]
- [4] 中华人民共和国生态环境部. 2023 年中国生态环境状况公报[R]. 北京: 中华人民共和国生态环境部, 2024. [Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. China ecological environment status bulletin 2023[R]. Beijing: Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, 2024. (in Chinese)]
- [5] 李圣品, 李文鹏, 殷秀兰, 等. 全国地下水质分布及变化特征[J]. 水文地质工程地质, 2019, 46(6): 1-8. [LI Shengpin, LI Wenpeng, YIN Xiulan, et al.

- Distribution and evolution characteristics of national groundwater quality from 2013 to 2017[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2019, 46(6): 1 – 8. (in Chinese with English abstract)]
- [6] 刘菲. 地下水系统中的新污染物 [J]. 水文地质工程地质, 2024, 51(2): 1 – 2. [LIU Fei. New pollutants in groundwater systems[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2024, 51(2): 1 – 2. (in Chinese)]
- [7] 李元杰, 王森杰, 张敏, 等. 土壤和地下水污染的监控自然衰减修复技术研究进展 [J]. *中国环境科学*, 2018, 38(3): 1185 – 1193. [LI Yuanjie, WANG Senjie, ZHANG Min, et al. Research progress of monitored natural attenuation remediation technology for soil and groundwater pollution[J]. *China Environmental Science*, 2018, 38(3): 1185 – 1193. (in Chinese with English abstract)]
- [8] 任静, 李娟, 席北斗, 等. 我国地下水污染防治现状与对策研究 [J]. *中国工程科学*, 2022, 24(5): 161 – 168. [REN Jing, LI Juan, XI Beidou, et al. Groundwater pollution prevention and control in China: Current status and countermeasures[J]. *Strategic Study of CAE*, 2022, 24(5): 161 – 168. (in Chinese with English abstract)]
- [9] 李凡, 李家科, 马越, 等. 地下水数值模拟研究与应用进展 [J]. *水资源与水工程学报*, 2018, 29(1): 99 – 104. [LI Fan, LI Jiako, MA Yue, et al. The research and application progress of numerical simulation on groundwater[J]. *Journal of Water Resources and Water Engineering*, 2018, 29(1): 99 – 104. (in Chinese with English abstract)]
- [10] 郭芷琳, 马瑞, 张勇, 等. 地下水污染物在高度非均质介质中的迁移过程: 机理与数值模拟综述 [J]. *中国科学(地球科学)*, 2021, 51(11): 1817 – 1836. [GUO Zhilin, MA Rui, ZHANG Yong, et al. Transport of groundwater contaminants in highly heterogeneous media: A review of mechanisms and numerical simulation[J]. *Scientia Sinica(Terrae)*, 2021, 51(11): 1817 – 1836. (in Chinese with English abstract)]
- [11] 王浩, 陆垂裕, 秦大庸, 等. 地下水数值计算与应用研究进展综述 [J]. *地学前缘*, 2010, 17(6): 1 – 12. [WANG Hao, LU Chuiyu, QIN Dayong, et al. Advances in method and application of groundwater numerical simulation[J]. *Earth Science Frontiers*, 2010, 17(6): 1 – 12. (in Chinese with English abstract)]
- [12] MCGUIRE M J. The chlorine revolution: Water disinfection and the fight to save lives[M]. Denver: American Water Works Association, 2013.
- [13] VITVAR T, AGGARWAL P K, MCDONNELL J J. A review of isotope applications in catchment hydrology[M]//AGGARWAL P K, GAT J R, FROELICH K F O. *Isotopes in the water cycle: Past, present and future of a developing science*. Dordrecht: Springer, 2005: 151 – 169.
- [14] KENDALL C, McDONNELL J J. *Isotope tracers in catchment hydrology*[M]. New York: Elsevier, 2012.
- [15] 葛源, 贺纪正, 郑袁明, 等. 稳定性同位素探测技术在微生物生态学研究中的应用 [J]. *生态学报*, 2006, 26(5): 1574 – 1582. [GE Yuan, HE Jizheng, ZHENG Yuanming, et al. Stable isotope probing and its applications in microbial ecology[J]. *Acta Ecologica Sinica*, 2006, 26(5): 1574 – 1582. (in Chinese with English abstract)]
- [16] 郑燕, 贾仲君. 新一代高通量测序与稳定性同位素示踪 DNA/RNA 技术研究稻田红壤甲烷氧化的微生物过程 [J]. *微生物学报*, 2013, 53(2): 173 – 184. [ZHENG Yan, JIA Zhongjun. Next generation sequencing and stable isotope probing of active microorganisms responsible for aerobic methane oxidation in red paddy soils[J]. *Acta Microbiologica Sinica*, 2013, 53(2): 173 – 184. (in Chinese with English abstract)]
- [17] SAIKI R K, GELFAND D H, STOFFEL S, et al. Primer-directed enzymatic amplification of DNA with a thermostable DNA polymerase[J]. *Science*, 1988, 239: 487 – 491.
- [18] MULLIS K B, FALOONA F A. Specific synthesis of DNA in vitro via a polymerase-catalyzed chain reaction[J]. *Methods in Enzymology*, 1987, 155: 335 – 350.
- [19] 李杨霞. 我国中西部地区热泉嗜热菌的分离和产酶研究及嗜热纤维素酶的初步纯化 [D]. 杭州: 浙江大学, 2007. [LI Yangxia. Isolation of thermophiles and screening of thermozymes from the hotspots of Mid-West-China and purification of a thermostable cellulase[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2007. (in Chinese with English abstract)]
- [20] 洪青. 中度嗜盐菌 BYS-1 (*Halomonas* sp.) 的生物学特性及其耐盐相关基因的克隆 [D]. 南京: 南京农业大学, 2003. [HONG Qing. Characteristics of a moderately halophilic bacterium BYS-1 (*Halomonas* sp.) and cloning of its salt-tolerance related gene[D]. Nanjing: Nanjing Agricultural University, 2003. (in Chinese with English abstract)]
- [21] 赵荫薇, 王世明. 微生物处理地下水石油污染的应用研究 [J]. *应用生态学报*, 1998, 9(2): 209 – 212. [ZHAO Yinwei, WANG Shiming. Microbial treatment of groundwater contaminated by petroleum application study[J]. *Chinese Journal of Applied Ecology*, 1998,

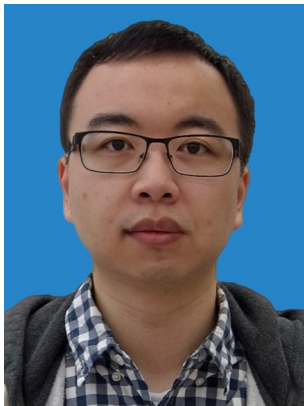
- 9(2): 209 – 212. (in Chinese with English abstract)]
- [22] 郑远扬. 石油污染生化治理的进展 [J]. 环境科学与管理, 1993, 25(3): 46 – 50. [ZHENG Yuanyang. Progress in biochemical treatment of oil pollution[J]. Environmental Science and Management, 1993, 25(3): 46 – 50. (in Chinese with English abstract)]
- [23] 滕应, 黄昌勇. 重金属污染土壤的微生物生态效应及其修复研究进展 [J]. 土壤与环境, 2002, 11(1): 85 – 89. [TENG Ying, HUANG Changyong. Ecological effect of heavy metals on soil microbes and research advances on the mechanisms of bioremediation[J]. Soil and Environmental Sciences, 2002, 11(1): 85 – 89. (in Chinese with English abstract)]
- [24] 王秀丽, 徐建民, 姚槐应, 等. 重金属铜、锌、镉、铅复合污染对土壤环境微生物群落的影响 [J]. 环境科学学报, 2003, 23(1): 22 – 27. [WANG Xiuli, XU Jianmin, YAO Huaiying, et al. Effects of Cu, Zn, Cd and Pb compound contamination on soil microbial community[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2003, 23(1): 22 – 27. (in Chinese with English abstract)]
- [25] 宋震宇, 杨伟, 王文茜, 等. 氯代烃污染地下水修复技术研究进展 [J]. 环境科学与管理, 2014, 39(4): 95 – 99. [SONG Zhenyu, YANG Wei, WANG Wenqian, et al. Research progress on restoring groundwater contaminated by chlorinated hydrocarbon[J]. Environmental Science and Management, 2014, 39(4): 95 – 99. (in Chinese with English abstract)]
- [26] 李军, 梁永平, 邹胜章, 等. 微生物在地下水污染修复中的应用研究进展 [J]. 环境污染与防治, 2021, 43(5): 638 – 643. [LI Jun, LIANG Yongping, ZOU Shengzhang, et al. Research progress on application of microorganism in groundwater pollution remediation[J]. Environmental Pollution and Control, 2021, 43(5): 638 – 643. (in Chinese with English abstract)]
- [27] CHAPPELLE F H. The significance of microbial processes in hydrogeology and geochemistry[J]. Hydrogeology Journal, 2000, 8(1): 41 – 46.
- [28] 张丽萍, 谢先军, 李俊霞, 等. 大同盆地地下水中砷的形态、分布及其富集过程研究 [J]. 地质科技通报, 2014, 33(1): 178 – 184. [ZHANG Liping, XIE Xianjun, LI Junxia, et al. Spatial variation, speciation and enrichment of arsenic in groundwater from the Datong basin, northern China[J]. Geological Science and Technology Information, 2014, 33(1): 178 – 184. (in Chinese with English abstract).]
- [29] SHAMSUDDUHA M, MARZEN L J, UDDIN A, et al. Spatial relationship of groundwater arsenic distribution with regional topography and water-table fluctuations in the shallow aquifers in Bangladesh[J]. Environmental Geology, 2009, 57(7): 1521 – 1535.
- [30] MEILE C, SCHEIBE T D. Reactive transport modeling of microbial dynamics[J]. Elements: An International Magazine of Mineralogy, Geochemistry, and Petrology, 2019, 15(2): 111 – 116.
- [31] THULLNER M, REGNIER P, VAN CAPPELLEN P. Modeling microbially induced carbon degradation in redox-stratified subsurface environments: Concepts and open questions[J]. Geomicrobiology Journal, 2007, 24(3/4): 139 – 155.
- [32] CURTIS G P. Comparison of approaches for simulating reactive solute transport involving organic degradation reactions by multiple terminal electron acceptors[J]. Computers & Geosciences, 2003, 29(3): 319 – 329.
- [33] 王建秀, 朱合华, 唐益群, 等. 石灰岩损伤演化的化学热力学及动力学模型 [J]. 同济大学学报(自然科学版), 2004, 32(9): 1126 – 1130. [WANG Jianxiu, ZHU Hehua, TANG Yiqun, et al. Chemical thermodynamic and chemical kinetic model for dissolution damage evolution in limestone[J]. Journal of Tongji University(Natural Science), 2004, 32(9): 1126 – 1130. (in Chinese with English abstract)]
- [34] ORTH J D, THIELE I, PALSSON B Ø. What is flux balance analysis[J]. Nature Biotechnology, 2010, 28(3): 245 – 248.
- [35] QIU Sizhe, YANG Aidong, ZENG Hong. Flux balance analysis-based metabolic modeling of microbial secondary metabolism: Current status and outlook[J]. PLoS Computational Biology, 2023, 19(8): e1011391.
- [36] MAHADEVAN R, EDWARDS J S, DOYLE F J 3rd. Dynamic flux balance analysis of diauxic growth in Escherichia coli[J]. Biophysical Journal, 2002, 83(3): 1331 – 1340.
- [37] REED D C, ALGAR C K, HUBER J A, et al. Gene-centric approach to integrating environmental genomics and biogeochemical models[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2014, 111(5): 1879 – 1884.
- [38] 王洪涛. 多孔介质污染物迁移动力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2008. [WANG Hongtao. Dynamics of fluid flow and contaminant transport in porous media[M]. Beijing: Higher Education Press, 2008. (in Chinese)]
- [39] MAGNABOSCO C, LIN L h, DONG H, et al. The biomass and biodiversity of the continental subsurface[J]. Nature Geoscience, 2018, 11(10): 707 – 717.
- [40] 张怀胜, 王梦园, 蔡五田, 等. 深层含氟地下水微生物群落组成及环境响应特征 [J]. 地球科学, 2023, 48(9):

- 3466 – 3479. [ZHANG Huaisheng, WANG Mengyuan, CAI Wutian, et al. Characteristics of microbial community composition and environmental response in deep fluorinated groundwater[J]. *Earth Science*, 2023, 48(9): 3466 – 3479. (in Chinese with English abstract)]
- [41] 李平, 谭添, 刘韩, 等. 地下水微生物功能群及生物地球化学循环 [J]. *微生物学报*, 2021, 61(6): 1598 – 1609. [LI Ping, TAN Tian, LIU Han, et al. Functional microbial communities and the biogeochemical cycles in groundwater[J]. *Acta Microbiologica Sinica*, 2021, 61(6): 1598 – 1609. (in Chinese with English abstract)]
- [42] LÜ Huixiong, WEI Jialu, TANG Guangxuan, et al. Microbial consortium degrading of organic pollutants: Source, degradation efficiency, pathway, mechanism and application[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2024, 451: 141913.
- [43] 支传顺, 胡晓农, 陈麟, 等. 微生物对海水入侵响应特征及指示意义的研究进展 [J]. *水文地质工程地质*, 2024, 51(2): 192 – 203. [ZHI Chuanshun, HU Xiaonong, CHEN Lin, et al. Research progress on the response characteristics and indicative significance of microorganisms to seawater intrusion[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2024, 51(2): 192 – 203. (in Chinese with English abstract)]
- [44] SAIYARI D M, CHUANG Huiping, SENORO D B, et al. A review in the current developments of genus *Dehalococcoides*, its consortia and kinetics for bioremediation options of contaminated groundwater[J]. *Sustainable Environment Research*, 2018, 28(4): 149 – 157.
- [45] KITAYAMA A. A study on biodegradation of aromatic hydrocarbons[D]. Tokyo: The University of Tokyo, 1997.
- [46] 郭华明, 高志鹏, 修伟. 地下水氮循环与硝迁移转化耦合的研究现状和趋势 [J]. *水文地质工程地质*, 2022, 49(3): 153 – 163. [GUO Huaming, GAO Zhipeng, XIU Wei. Research status and trend of coupling between nitrogen cycle and arsenic migration and transformation in groundwater systems[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2022, 49(3): 153 – 163. (in Chinese with English abstract)]
- [47] 苏夏. 微氧尺度下甲烷氧化调控覆盖层微生物降解氯代烯烃的机理研究 [D]. 重庆: 重庆理工大学, 2024. [SU Xia. Study on the mechanism of methane oxidation regulating microbial degradation of chloroethenes in landfill cover at hypoxia Scale[D]. Chongqing: Chongqing University of Technology, 2024. (in Chinese with English abstract)]
- [48] REISINGER A J, GROFFMAN P M, ROSI-MARSHALL E J. Nitrogen cycling process rates across urban ecosystems[J]. *FEMS Microbiology Ecology*, 2016, 92(12): fiw198.
- [49] ANANTHARAMAN K, BROWN C T, HUG L A, et al. Thousands of microbial genomes shed light on interconnected biogeochemical processes in an aquifer system[J]. *Nature Communications*, 2016, 7(1): 13219.
- [50] TRAUTH N, SCHMIDT C, VIEWEG M, et al. Hyporheic transport and biogeochemical reactions in pool-riffle systems under varying ambient groundwater flow conditions[J]. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2014, 119(5): 910 – 928.
- [51] GROFFMAN P M, LAW N L, BELT K T, et al. Nitrogen fluxes and retention in urban watershed ecosystems[J]. *Ecosystems*, 2004, 7(4): 393 – 403.
- [52] SHABAROVA T, SALCHER M M, PORCAL P, et al. Recovery of freshwater microbial communities after extreme rain events is mediated by cyclic succession[J]. *Nature Microbiology*, 2021, 6(4): 479 – 488.
- [53] LI Minjing, QIAN Weijun, GAO Yuqian, et al. Functional enzyme-based approach for linking microbial community functions with biogeochemical process kinetics[J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, 51(20): 11848 – 11857.
- [54] LUO Moye, ZHANG Xiaodong, ZHU Xin, et al. Bioremediation of chlorinated ethenes contaminated groundwater and the reactive transport modeling: A review[J]. *Environmental Research*, 2024, 240(Pt 2): 117389.
- [55] HUI Cizhang, LI Yi, ZHANG Wenlong, et al. Modelling structure and dynamics of microbial community in aquatic ecosystems: The importance of hydrodynamic processes[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 605: 127351.
- [56] STROO H F. Bioremediation of chlorinated solvent plumes[M]//STROO H F, WARD C H. In situ remediation of chlorinated solvent plumes. New York: Springer, 2010: 309–324.
- [57] VAN WEY A S, LOVATT S J, ROY N C, et al. Determination of potential metabolic pathways of human intestinal bacteria by modeling growth kinetics from cross-feeding dynamics[J]. *Food Research International*, 2016, 88: 207 – 216.
- [58] VAN WEY A S, COOKSON A L, ROY N C, et al. Monoculture parameters successfully predict coculture growth kinetics of *Bacteroides thetaiotaomicron* and two *Bifidobacterium* strains[J]. *International Journal of Food Microbiology*, 2014, 191: 172 – 181.

- [59] MONOD J. The growth of bacterial cultures[J]. *Annual Review of Microbiology*, 1949, 3: 371 – 394.
- [60] DOLINOVÁ I, ŠTROJSOVÁ M, ČERNÍK M, et al. Microbial degradation of chloroethenes: A review[J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2017, 24(15): 13262 – 13283.
- [61] ROLLE M, CLEMENT T P, SETHI R, et al. A kinetic approach for simulating redox-controlled fringe and core biodegradation processes in groundwater: Model development and application to a landfill site in piedmont, Italy[J]. *Hydrological Processes*, 2008, 22(25): 4905 – 4921.
- [62] CHAPELLE F H, MCMAHON P B, DUBROVSKY N M, et al. Deducing the distribution of terminal electron-accepting processes in hydrologically diverse groundwater systems[J]. *Water Resources Research*, 1995, 31(2): 359 – 371.
- [63] CHAPELLE F H, BRADLEY P M, LOVLEY D R, et al. Rapid evolution of redox processes in a petroleum hydrocarbon-contaminated aquifer[J]. *Ground Water*, 2002, 40(4): 353 – 360.
- [64] CHRISTENSEN T H, KJELDSSEN P, BJERG P L, et al. Biogeochemistry of landfill leachate plumes[J]. *Applied Geochemistry*, 2001, 16(7/8): 659 – 718.
- [65] BAEDECKER M J, BACK W. Hydrogeological processes and chemical reactions at a landfill[J]. *Ground Water*, 1979, 17(5): 429 – 437.
- [66] BRADLEY J A, AMEND J P, LAROWE D E. Necromass as a limited source of energy for microorganisms in marine sediments[J]. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2018, 123(2): 577 – 590.
- [67] LIU Yuanyuan, LIU Chongxuan, NELSON W C, et al. Effect of water chemistry and hydrodynamics on nitrogen transformation activity and microbial community functional potential in hyporheic zone sediment columns[J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, 51(9): 4877 – 4886.
- [68] LOUCA S, HAWLEY A K, KATSEV S, et al. Integrating biogeochemistry with multiomic sequence information in a model oxygen minimum zone[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2016, 113(40): E5925 – E5933.
- [69] SEAVER S M D, LIU F, ZHANG Qizhi, et al. The ModelSEED biochemistry database for the integration of metabolic annotations and the reconstruction, comparison and analysis of metabolic models for plants, fungi and microbes[J]. *Nucleic Acids Research*, 2021, 49(D1): D575 – D588.
- [70] PANIKOV N S. Genome-Scale reconstruction of microbial dynamic phenotype: Successes and challenges[J]. *Microorganisms*, 2021, 9(11): 2352.
- [71] PINZON W, VEGA H, GONZALEZ J, et al. Mathematical framework behind the reconstruction and analysis of genome scale metabolic models[J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2019, 26(5): 1593 – 1606.
- [72] KIM B, KIM W J, KIM D I, et al. Applications of genome-scale metabolic network model in metabolic engineering[J]. *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*, 2015, 42(3): 339 – 348.
- [73] KIM T Y, SOHN S B, KIM Y B, et al. Recent advances in reconstruction and applications of genome-scale metabolic models[J]. *Current Opinion in Biotechnology*, 2012, 23(4): 617 – 623.
- [74] CHAN S H J, CAI Jingyi, WANG Lin, et al. Standardizing biomass reactions and ensuring complete mass balance in genome-scale metabolic models[J]. *Bioinformatics*, 2017, 33(22): 3603 – 3609.
- [75] DIAS O, ROCHA M, FERREIRA E C, et al. Reconstructing high-quality large-scale metabolic models with merlin[M]//FONDI M. *Metabolic network reconstruction and modeling: Methods and protocols*. New York: Humana Press, 2018: 1-36.
- [76] KOREM T, ZEEVI D, SUEZ J, et al. Growth dynamics of gut microbiota in health and disease inferred from single metagenomic samples[J]. *Science*, 2015, 349: 1101 – 1106.
- [77] ZHANG T, PARKER A, CARLSON R P, et al. Multiscale flux-based modeling of biofilm communities[J]. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2020, 18(2): 1025 – 1052.
- [78] KAUFFMAN K J, PRAKASH P, EDWARDS J S. Advances in flux balance analysis[J]. *Current Opinion in Biotechnology*, 2003, 14(5): 491 – 496.
- [79] SAHU A, BLÄTKE M A, SZYMAŃSKI J J, et al. Advances in flux balance analysis by integrating machine learning and mechanism-based models[J]. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 2021, 19: 4626 – 4640.
- [80] COVERT M W, SCHILLING C H, PALSSON B. Regulation of gene expression in flux balance models of metabolism[J]. *Journal of Theoretical Biology*, 2001, 213(1): 73 – 88.
- [81] BENYAMINI T, FOLGER O, RUPPIN E, et al. Flux balance analysis accounting for metabolite dilution[J]. *Genome Biology*, 2010, 11(4): R43.

- [82] KHANDELWAL R A, OLIVIER B G, RÖLING W F M, et al. Community flux balance analysis for microbial consortia at balanced growth[J]. *PLoS One*, 2013, 8(5): e64567.
- [83] SAA P A, NIELSEN L K. Formulation, construction and analysis of kinetic models of metabolism: A review of modelling frameworks[J]. *Biotechnology Advances*, 2017, 35(8): 981 – 1003.
- [84] DAMIANI A L, HE Q P, JEFFRIES T W, et al. Comprehensive evaluation of two genome-scale metabolic network models for *Scheffersomyces stipitis*[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2015, 112(6): 1250 – 1262.
- [85] GEER L Y, MARCHLER-BAUER A, GEER R C, et al. The NCBI BioSystems database[J]. *Nucleic Acids Research*, 2010, 38(Sup 1): D492 – D496.
- [86] FEDERHEN S. The NCBI taxonomy database[J]. *Nucleic Acids Research*, 2012, 40(D1): D136 – D143.
- [87] BROWN G R, HEM V, KATZ K S, et al. Gene: A gene-centered information resource at NCBI[J]. *Nucleic Acids Research*, 2015, 43(D1): D36 – D42.
- [88] DEVOID S, OVERBEEK R, DEJONGH M, et al. Automated genome annotation and metabolic model reconstruction in the SEED and Model SEED[M]// ALPER H S. *Systems Metabolic Engineering: Methods and Protocols*. Totow: Humana Press, 2013: 17 – 45.
- [89] ARKIN A P, COTTINGHAM R W, HENRY C S, et al. KBase: The United States department of energy systems biology knowledgebase[J]. *Nature Biotechnology*, 2018, 36(7): 566 – 569.
- [90] MILLS R T, LU Chuan, LICHTNER P C, et al. Simulating subsurface flow and transport on ultrascale computers using PFLOTTRAN[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2007, 78(1): 012051.
- [91] LICHTNER P C, HAMMOND G E, LU Chuan, et al. PFLOTTRAN user manual: A massively parallel reactive flow and transport model for describing surface and subsurface processes; LA-UR-15-20403[R/OL]. <https://www.osti.gov/biblio/1168703/>. (2015-01-20) [2024-12-05]
- [92] HAMMOND G E, LICHTNER P C, MILLS R T. Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: An illustrative example with PFLOTTRAN[J]. *Water Resources Research*, 2014, 50(1): 208 – 228.
- [93] SOBIE E A. An introduction to MATLAB[J]. *Science Signaling*, 2011, 4(191).
- [94] HEIRENDT L, ARRECKX S, PFAU T, et al. Creation and analysis of biochemical constraint-based models using the COBRA Toolbox v. 3.0[J]. *Nature Protocols*, 2019, 14(3): 639 – 702.
- [95] PRYOR R W. Multiphysics modeling using COMSOL: A first principles approach[M]. Sudbury: Jones and Bartlett Publishers, Inc., 2009.
- [96] PEPPER D W, HEINRICH J C. The finite element method: Basic concepts and applications with MATLAB, MAPLE, and COMSOL[M]. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press, 2017.
- [97] KIM S E, CHOUDHURY D, PATEL B. Computations of complex turbulent flows using the commercial code fluent[M]//SALAS M D, HEFNER J N, SAKELL L. *Modeling complex turbulent flows*. Dordrecht: Springer, 1999: 259 – 276.
- [98] WANG Lian, CHU Xihua, WAN Ji, et al. Implementation of micropolar fluids model and hydrodynamic behavior analysis using user-defined function in FLUENT[J]. *Advances in Mechanical Engineering*, 2020, 12(7): 168781402094305.

编辑: 宗 爽



戴恒, 中国地质大学(武汉)微生物与环境全国重点实验室研究员, 博士生导师, 国家优秀青年科学基金获得者。主要从事水文地质领域地下水模拟、不确定性分析、人工智能方法应用等方面研究。在 *Water Resources Research* 等知名期刊上发表 SCI 论文 40 余篇, 已主持国家自然科学基金 3 项, 作为项目骨干参与国家重点研发计划 2 项。现担任水文与地球科学领域重要 SCI 期刊 *Journal of Hydrology* 与 *Hydrology and Earth System Sciences*(HESS) 副主编, 水利工程领域 SCI 期刊 *Journal of Hydrologic Engineering* 副主编, 并担任国际水文科学协会中国委员会地下水分委员会与国际水资源学会中国委员会地下水专委会委员。