

研究报告



基于多 Agent 仿真解析处理剩余污泥的微生物电解池种群 互作关系

梁庆^{1,2} 李华华^{1,2} 邢德峰^{*1,2}

1 哈尔滨工业大学环境学院 黑龙江 哈尔滨 150090

2 城市水资源与水环境国家重点实验室 黑龙江 哈尔滨 150090

摘要:【背景】微生物电化学系统耦合了电化学反应和厌氧消化过程,在处理剩余污泥同时实现能源回收,成为具有应用前景的技术之一。揭示电活性生物膜和活性污泥种群互作机制,有助于进一步调控和强化系统性能。高通量核酸测序技术研究微生物群落具有投入大、耗时长和不可预测的缺点,开展微生物群落动态仿真可以更有效地预测群落结构与功能。【目的】研究厌氧消化和生物电化学系统的微生物种间热力学与动力学的演化规律。在考虑电子供体、电子受体、温度、pH 值等生态条件下,分析底物的电子流向及微生物群落结构的动态变化。【方法】通过对剩余污泥处理的微生物电解池(Microbial electrolytic cell, MEC)建立一个多 Agent 仿真(Multi-agent-based simulation, MAS)模型,评估 MEC 对底物氧化电子转移的能量效率和传质效率,模拟微生物群落结构实时变化,同时耦合动力学和热力学分析;揭示影响 MES 运行的电子流向决定性因素及相应的微生物种群,为复杂污染物生物处理系统中种间互作和动力学研究提供基础依据。【结果】通过 MAS 模拟,确定 MEC 污泥处理工艺的最佳能量传递效率与传质效率为 $\eta=0.2$, $\epsilon=0.5$, MAS 结合热力学与动力学参数模拟微生物的群落动态与实验组有较高的吻合性。在长期的运行中,微生物电化学系统中丙酮酸没有积累。【结论】证实了 MAS 结合热力学与动力学参数可以预测微生物的群落动态,并进行实时监测。研究表明多 Agent 仿真为微生物群落结构动态变化提供了一种新的研究方法,该方法与高通量核酸测序技术进行校验和联用,为人工和自然生态系统中微生物种群预测与评估研究提供一个新的手段。

关键词: 多 Agent 仿真, 热力学, 动力学, 微生物电化学系统, 剩余污泥

Multi-agent simulation predicts interspecies interaction in microbial electrolysis cell using waste sludge

LIANG Qing^{1,2} LI Hua-Hua^{1,2} XING De-Feng^{*1,2}

1 School of Environment, Harbin Institute of Technology, Harbin, Heilongjiang 150090, China

2 State Key Laboratory of Urban Water Resources and Environment, Harbin, Heilongjiang 150090, China

Abstract: [Background] Microbial electrochemical system (MES) is coupled with electrochemical reaction

Foundation items: National Natural Science Foundation of China (31870114); National Key Research and Development Program of China (2018YFD1100503)

***Corresponding author:** Tel: 86-451-86283123; E-mail: dxing@hit.edu.cn

Received: 03-05-2019; **Accepted:** 12-06-2019; **Published online:** 13-06-2019

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(31870114); 国家重点研发计划(2018YFD1100503)

***通信作者:** Tel: 0451-86283123; E-mail: dxing@hit.edu.cn

收稿日期: 2019-05-03; **接受日期:** 2019-06-12; **网络首发日期:** 2019-06-13

and anaerobic digestion process. It is one of the technologies for implementing simultaneously energy recovery and waste sludge treatment. Understanding the syntrophic interaction in electroactive biofilm and activated sludge will be helpful to enhance the ability and regulation of bioreactors. High-throughput nucleic acid sequencing technology has the disadvantages of high cost, long time consumption and unpredictability. Therefore, dynamic simulation of microbial community will effectively predict structure and function. **[Objective]** The evolution of thermodynamics and kinetics between microbial species in anaerobic digestion and bioelectrochemical system was studied. Under the different ecological conditions including electron donor, electron acceptor, temperature and pH value, the electron flow direction of substrate and the dynamic change of microbial community structure were analyzed. **[Methods]** A multi-agent-based simulation (MAS) model was established for the microbial electrolysis cell (MEC) fed with waste sludge to evaluate the energy efficiency, mass transfer efficiency, and electron transfer from substrate oxidation of MEC, and to simulate the real-time change of microbial community structure coupled with dynamic and thermodynamic analysis. It revealed the decisive factors affecting the electronic flow direction of MEC and the corresponding microbial community, and provided the basis research on interspecies interaction and dynamics in the biological treatment system in complex pollutants. **[Results]** The optimal energy transfer efficiency (0.2) and mass transfer efficiency (0.5) of the MEC using waste sludge were determined through MAS simulation. The predicted microbial community dynamics under MAS with thermodynamic and kinetic parameters agreed with the high-throughput sequencing of 16S rRNA gene. Propionic acid was not accumulated in MEC during long-term operation. **[Conclusion]** It confirms that MAS combined thermodynamic and kinetic parameters can real-time predict the microbial community dynamics. The research shows that multi-agent simulation provides a new method to monitor the change of microbial community structure, which is flexible to combine with high-throughput nucleic acid sequencing technology, and will become a new approach for the prediction and estimation of microbial community in the engineered and natural ecosystems.

Keywords: Multi-agent-based simulation, Thermodynamics, Kinetics, Microbial electrochemical system, Waste sludge

剩余污泥是污水处理系统产生的废弃活性污泥, 由于其有机物含量高, 需要进行处理和稳定化, 避免产生二次环境污染^[1-3]。厌氧消化(Anaerobic digestion, AD)可以在处理剩余污泥同时回收生物能源, 成为具有广泛应用前景的技术之一。与厌氧消化技术相比, 微生物电化学技术(Microbiological electrochemical technique, MET)具有更快速的反应动力学, 因此污泥减量速率和产甲烷速率更高^[2]。在厌氧消化污泥和微生物电化学系统的电极生物膜中存在不同功能的微生物种群, 这些种群通过不同的互动方式来实现有机物氧化和电子梯级转移, 最终实现产氢、产甲烷和产电过程^[4-6]。除了微生物分子生态学研究技术, 通过数学模拟可以评估不同反应过程参与的功能种群及其捕获的能量, 分析电子在种群间的流动和分布^[5,7]。近年来, 厌氧消化模型(Anaerobic digestion model, ADM)作为模拟和预测的有效工具被广泛应用于厌氧消化工艺优化设计。然

而, 国际水协(The International Water Association, IWA)厌氧消化 1 号模型(Anaerobic digestion model 1, ADM1)无法预测种群的动态和系统发育及种间电子传递机制等信息^[8], 这导致对反应器运行过程中的微生物动力学和电子动态变化研究过于简化, 很难预测种间电子传递和微生物群落结构之间互作关系。基于多 Agent 仿真模型(Multi-agent-based simulation, MAS)能够预测种群间存在的实时互作过程, 综合分析涉及的众多变量的影响^[9-10]。由于 MAS 具有可处理性、异质性和时间尺度性, 已经被应用于不同生化系统的非线性互作模拟^[11-12], 因此 MAS 可以用于微生物群落及其热力学或动力学研究。

Oyetunde 等建立了动力学调控的多反应模型, 预测了微生物电化学系统的电流输出^[13], 但这一研究没有对微生物群落结构进行预测。我们的前期工作开发了热力学与动力学结合的多 Agent 仿真 MAS, 证实了 MAS 可以对微生物脱盐池阳极室的

不同种群及其种间互作进行评估^[10]。热力学提供了种间电子能量流,从而获得驱动反应的化学计量学。McCarty 等建立的生物热力学耦合动力学模型表明,最小底物浓度与微生物稳定期时的吉布斯自由能有关^[14]。这说明动力学和热力学的耦合可以将微生物群落结构与电子传递之间建立联系。利用 NetLogo 软件对数据进行编程,可将每种功能微生物对应的生化反应涉及的底物、产物及电子定义为 MAS 中的一个变量^[15-17]。生化反应数据由动力学和热力学耦合参数来指导,即输入种间函数的热力学电子当量模型 TEEM 和 Monod 方程。目前,利用多 Agent 仿真进行微生物种群互作及热力学研究报道甚少。

本研究的目的是评估结合微生物热力学和动力学方程的多 Agent 仿真方法预测微生物种群互作及电子流分布规律的可能性。以处理剩余污泥的微生物电解池(Microbial electrolytic cell, MEC)电活性生物膜建立一个 MAS 模型,揭示影响 MEC 电子流向的决定性因素和微生物种群动态及互作机制。

1 材料与方法

1.1 MEC 反应器运行与微生物群落分析数据来源

本研究模拟的原始数据来源于课题组前期研究成果^[18],该研究分析了微生物电解池(MEC)利用剩余污泥产甲烷和微生物群落分析。在耦合热力学与动力学基础上,本研究利用 NetLogo 编程软件进行多仿真模拟,解析剩余污泥处理微生物电解池的种群互作。

1.2 热力学与动力学耦合

利用热力学方法预测了细胞合成和能量生成的电子流向,并用一些统计参数来支持动力学方程,具体参数如下分步介绍。利用 TEEM 方程和 Monod 方程联合分析种群间关系的驱动规律。这两种电子流动方式可以用方程表示:

$$\frac{\Delta E}{t} = \frac{\Delta E_c}{t} + \frac{\Delta E_e}{t} = f_s \frac{\Delta E}{t} + f_e \frac{\Delta E}{t} \quad (1)$$

ΔE 为底物分解释放的总电子当量(mEq/L), ΔE_c 为底物分解用于细胞生长的电子当量(mEq/L), ΔE_e 为底

物分解用于胞外物质合成所需的电子当量(mEq/L), f_s 和 f_e 是细胞合成和胞外物质合成能量系数。

f_s^0 (f_s 的理论最大值)可由下式计算:

$$f_s^0 = \frac{\varepsilon \Delta G_r}{\varepsilon \Delta G_r - \frac{\Delta G_p}{\varepsilon^n} - \frac{\Delta G_{pc}}{\varepsilon}} \quad (2)$$

ΔG_p 为二氧化碳合成丙酮酸所需要的能量, ΔG_{pc} 是用于丙酮酸转化为细胞生长的能量, ΔG_r 是每当量供体氧化释放的自由能, ε 是能量传送效率。

然后利用热力学参数估计理论产率(Y),并与 Monod 方程相联系:

$$\hat{E} = \eta \hat{E}_{\text{Max}} \frac{S}{K_m + S} \quad (3)$$

η 是用 Attached-growth 方程修正的传质效率系数, K_m 为半饱和常数, S 是底物浓度, \hat{E} 是底物进入细胞的电子释放速率。

产量(Y)按 E_{qs} 计算, f_s 估计不同能量转移效率(ε)为 0.5-0.7。表 1 列出了所有可能的反应及其动力学系数(半饱和常数、 K_m 和衰减率 b)。当底物浓度(S)大于 K_m 时,选择动力学系数在 MAS 中使用。用于生物电化学反应的 b 值可根据 ADM1 计算^[38]。

1.3 MAS 计算

利用 NetLogo 软件(<http://ccl.northwestern.edu/netlogo/>)开发 MAS 算法。该算法定义了 5 个官能团,执行 18 种不同的反应,对应 18 种代谢功能(表 1)。所有的 Agent 都遵循 TEEM 和 Monod 方程的耦合调节,每种 Agent 都有其固有的特性,代表不同的代谢途径和相关环境变量(表 1)。根据环境条件实时评估每个 Agent 在每个步骤中底物 and 不同中间代谢产物对应的反应。初级电子供体为污泥中的多糖与蛋白质。它们被微生物消耗并产生电子和初级产物,初级产物分别充当第二和/或第三电子供体。该算法调节微生物与其相邻的微生物和胞外电子供体/受体(Agent)之间的相互作用(合作和/或竞争)。根据缓冲模型的编程方法^[39],在仿真中引入反应概率来表示反应速率,将模型中每个时间步长设置为 1 h。复杂系统的相互作用关系可以由其固有的并行结构来解释。

表 1 阳极体系中存在的生化反应

Table 1 Potential reactions in the anode chamber

Functional group	Metabolic function	Stoichiometry	Electron transfer (mmol/mmol reaction)	$\Delta_r G_0^*$ (kJ/mEq)	K_m (mmol/L)	b (d^{-1})	References
Fermentative bacteria	R1	$6C_3H_4O_3 \rightarrow 4C_2H_5COO^- + 2CH_3COO^- + 2CO_2 + 2H_2O + 6H^+$	8	-114.64	10.50	0.090	[19-20]
	R2	$2C_3H_4O_3 \rightarrow 2CH_3CH_2OH + 2CO_2$	8	-27.29	16.30	0.080	[21]
Exoelectrogens	R3	$CH_3COO^- + 2H_2O \rightarrow 2CO_2 + 7H^+ + 8e^-$	8	-25.92	2.42	0.070	[22]
	R4	$CH_3CH_2COO^- + 2H_2O \rightarrow CH_3COO^- + CO_2 + 7H^+ + 6e^-$	6	-33.18	3.20	0.060	[22]
	R5	$CH_3CH_2OH + H_2O \rightarrow CH_3COO^- + 5H^+ + 4e^-$	4	-37.46	2.20	0.060	[22]
Methanogens	R6	$7H^+ + 7e^- \rightarrow 3.5H_2$	7	-34.20	2.10	0.050	[22]
	R7	$CH_3COO^- + H^+ \rightarrow CO_2 + CH_4$	1	-11.48	0.86	0.030	[23]
	R8	$4H_2 + CO_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O$	8	-15.38	2.32	0.017	[24]
Hydrogen producing bacteria	R9	$2C_3H_4O_3 + 2H_2O \rightarrow 2CH_3COO^- + 2H^+ + 2CO_2 + 4H_2$	8	-24.88	12.60	0.020	[25]
	R10	$CH_3COO^- + H^+ + 2H_2O \rightarrow 2CO_2 + 4H_2$	8	13.95	12.50	0.015	[26]
	R11	$C_2H_5COO^- + 2H_2O \rightarrow CH_3COO^- + CO_2 + 3H_2$	6	13.33	14.90	0.041	[27-28]
Sulfate reducing bacteria	R12	$2C_3H_4O_3 + SO_4^{2-} \rightarrow 2CH_3COO^- + 2CO_2 + HS^- + H^+ + 2H_2O$	8	-43.90	2.62	0.250	[29-30]
	R13	$4C_2H_5COO^- + 3SO_4^{2-} + 3H^+ \rightarrow 4CH_3COO^- + 4CO_2 + 3HS^- + 4H_2O$	18	-7.58	4.00	0.020	[31]
	R14	$CH_3COO^- + SO_4^{2-} + 2H^+ \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O + HS^-$	8	-5.07	1.30	0.010	[32]
	R15	$4C_3H_4O_3 + 12SO_4^{2-} \rightarrow 3CH_3COO^- + 6CO_2 + 12SO_3^{2-} + 3H^+ + 6H_2O$	24	-1.51	7.12	0.040	[33-34]
	R16	$4C_3H_4O_3 + 6SO_4^{2-} + 3H^+ \rightarrow 3CH_3COO^- + 6CO_2 + 3S_2O_3^{2-} + 9H_2O$	24	-28.22	8.00	0.086	[35]
	R17	$4SO_3^{2-} + H^+ \rightarrow 3SO_4^{2-} + HS^-$	6	-39.26	0.50	0.012	[36]
	R18	$S_2O_3^{2-} + H_2O \rightarrow SO_4^{2-} + HS^- + H^+$	1	-21.87	50.00	0.050	[37]

2 结果与分析

2.1 能量效率与传质效率的确定

输入不同的传质效率($\eta=0.05$ 、 0.1 、 0.2 、 0.3 、 0.4)和能量传递效率($\varepsilon=0.5$ 、 0.55 、 0.6 、 0.65 、 0.7)进行模拟,比较分析了 MAS 输出结果与实际产甲烷率的变化(图 1)。在所有模拟结果均达到最大产甲烷率($0.28 \text{ m}^3/\text{m}^3$)时,与实验数据 $0.29 \text{ m}^3/\text{m}^3$ 接近。在 0.1 、 0.2 、 0.3 和 0.4 的传质效率(η)下,反应器从启动运行到稳定阶段的模拟结果与实验数据吻合较好。与实验结果相吻合的 η (0.2)与 ε (0.5)被用于之后的模拟种间互动动力学研究。

2.2 MAS 仿真群落结构

实验基于 18 组生化反应与微生物活性衰减数据,通过 MAS 模拟了稳定期的微生物群落结构(图 2),通过比较 10 个稳定运行周期的四类不同的功能微生物群落结构(发酵菌+产氢菌、电活性菌、产甲烷菌和硫化菌+硫还原菌)的相对丰度。四类功能

微生物群落中,除实验组产甲烷群落结构组成与 MAS 模拟结果存在少许差异,其它三类功能群 MAS 模拟的微生物结构与实验结果的微生物丰度上具有很好的一致性。MAS 预测的产甲烷种群相对丰度低于实验组,因此需要对 MEC 的热力学与动力学数据参数的设置进一步修正。研究表明微生物电化学系统利用活性污泥产甲烷,是由电催化与微生物共同作用的结果^[40]。

2.3 活性微生物积累与电子流分布仿真模拟

MAS 模拟长期运行的 MEC 污泥产甲烷数据表明在 10 000 h 模拟下活性微生物积累、动态和电子流分布情况会随着时间发生明显的变化(图 3)。在 0-1 200 h,系统中电活性微生物与产甲烷菌的积累量会逐渐提高,但电活性微生物的积累速度明显高于产甲烷菌的积累速度,导致系统中前期氢气的产量要高于甲烷的产量。1 200 h 后,虽然电活性微生物的积累量仍然很多,但产甲烷菌的积累量随着反

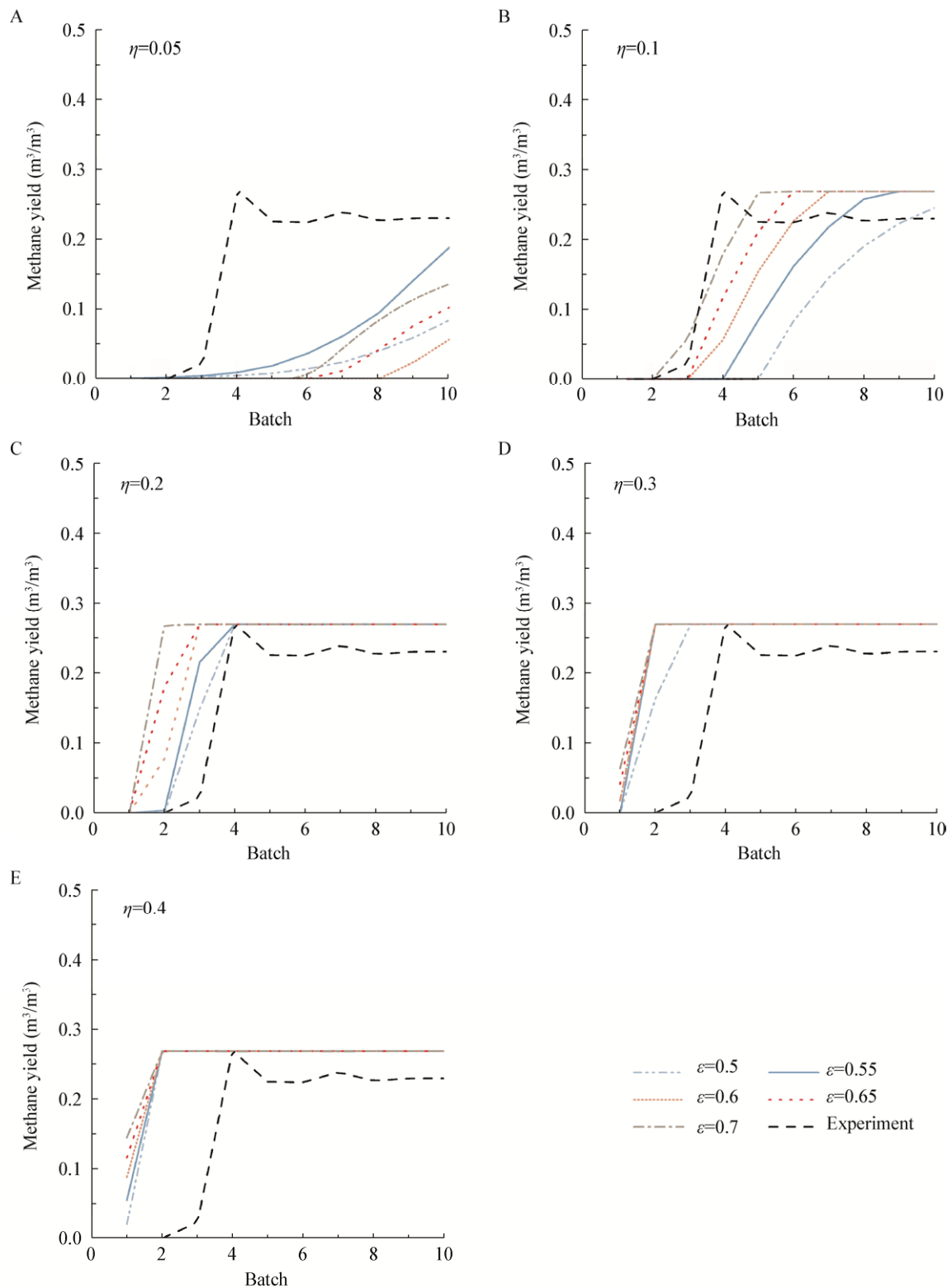


图 1 实验与 MAS 中不同能量传递效率(ϵ)和传质效率(η)下的甲烷产率

Figure 1 Methane production rate of experimental and MAS results with different energy transfer efficiency (ϵ) and mass transfer efficiency (η)

应器的运行而逐渐增多。在 3 800 h 时电活性微生物与产甲烷菌的积累量持平, 此阶段电活性微生物为主要菌群, 其次为产甲烷菌。2 400 h 后, 输出电压也明显下降。3 800 h 后, 产甲烷种群的积累量逐渐高于电活性微生物, 导致系统的甲烷产量逐渐提升, 产氢量逐渐降低, 最后由产氢系统转化为产甲烷系统。这与之前的报道结果相吻合^[22]。在长期的系统运行过程中, 最终产甲烷菌为优势菌群, 其次为电活性微生物, 最后为厌氧发酵微生物。

MAS 对底物电子流向的模拟表明 85% 的电子最初被厌氧发酵菌群(R1, 约 21%)捕获, 然后电子逐渐流入电活性微生物群落(R3, 约 38%)、丙酸电活性菌(R4, 约 20%)和产甲烷菌(R7, 约 42%) (图 3B)。最后流向产甲烷菌的电子逐渐增多(55%); 电发酵菌的电子流入逐渐减少, 最终稳定在 10%左右。

2.4 种间电子流网络

图 4 显示了 MAS 对稳定运行的微生物群落结构的电子流分布模拟。在 2 400 h 内, 电活性微生物

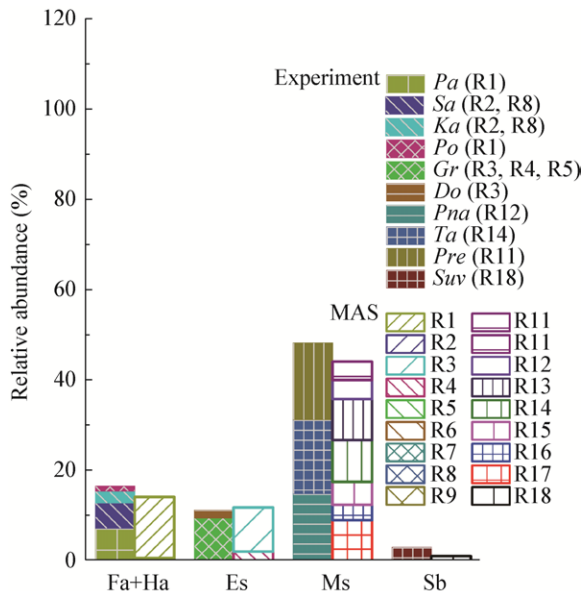


图 2 微生物群落结构与 MAS 模拟微生物结构比较
Figure 2 Comparison of microbial community structures and MAS

Note: $\eta=0.2$; $\varepsilon=0.5$; Pa: *Propionicicella*; Sa: *Spirochaeta*; Ka: *Klebsiella*; Po: *Propionivibrio*; Gr: *Geobacter*; Do: *Desulfuromonadales*; Pna: *Petrimonas*; Ta: *Thauera*; Pre: *Proteocatella*; Suv: *Sulfuricurvum*.

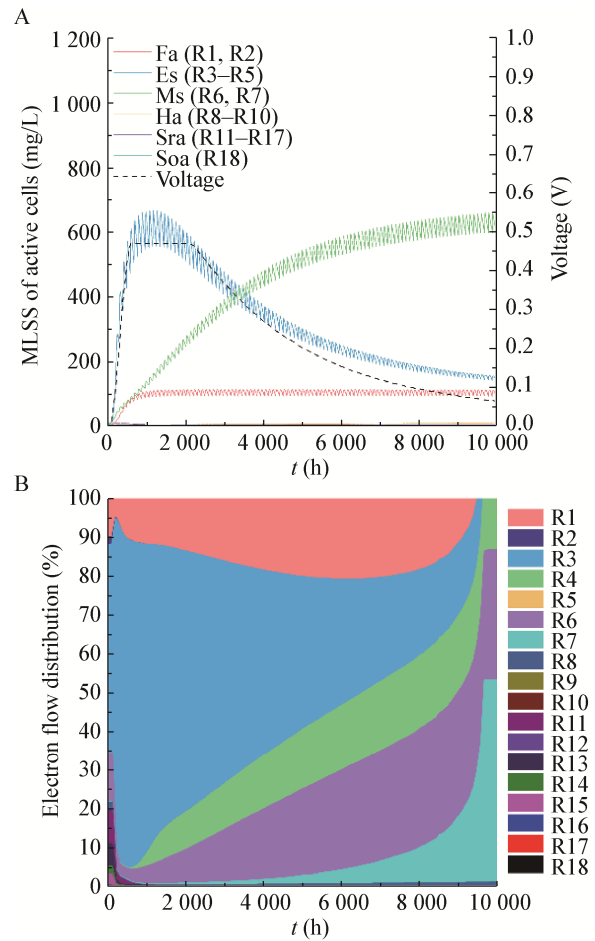


图 3 长期运行中活性微生物积累量(A)与最大输出电压(B)电子流分布仿真

Figure 3 The accumulation of active microorganisms and maximum output voltage (A) and electron flow distribution in long-term simulation (B)

Note: Fa: Fermentative bacteria; Es: Exoelectrogens; Ms: Methanogens; Ha: Hydrogen producing bacteria; Sra: Sulfate reducing bacteria; Soa: Sulfur oxidizing bacteria.

物占主导地位, 相应的峰值输出电压为 480 mV。然而, 2 400 h 后, 输出电压下降, 产甲烷菌增加。乙酸产甲烷和丙酸产电产氢过程共存。丙酸产电产氢生成致使丙酸没有积累。随着长期乙酸盐产电产氢过程的进行致使乙酸盐含量持续性降低, 积累的大量电子在阴极与生成的氢气产生甲烷, 产甲烷菌和丙酸产电产氢共存。从电子流网络分析表明丙酮酸、乙酸和丙酸是主要的电子供体, 其电子流主要流向电活性微生物与产甲烷微生物, 还有一部分流向厌氧发酵微生物。

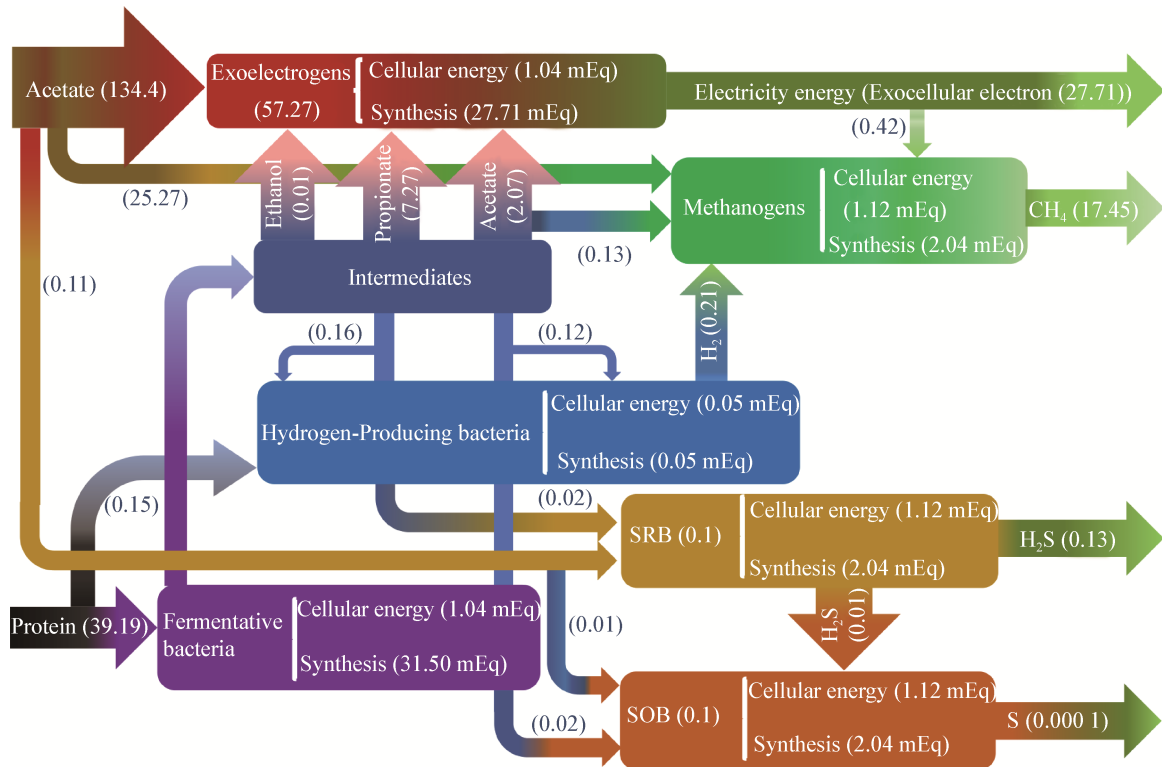


图 4 MEC 稳定运行过程种间电子流网络

Figure 4 Interspecies electron flow network in MEC

Note: $\eta=0.2$; $\varepsilon=0.5$; mEq: Unit.

3 讨论与结论

本研究通过不同能量传递效率的输入,在 0.1 和 0.2 的传质效率(η)下稳定运行后,模拟产甲烷率略高于实验结果,但与实验结果差距不大。与实验结果比较后确定该 MEC 处理剩余污泥反应器运行的传质效率为 0.2,能量传递效率为 0.5。不同的 MEC 反应器、构型及运行条件等诸多因素都会对反应器的能量传递效率和传质效率产生影响。为了能更准确地模拟后续群落结构及能量流变化,能量传递效率和传质效率的确认是关键一步,能量传递效率和传质效率高决定了反应器运行的好坏,通过对反应器稳定运行模拟与实验数据的比对,该反应器的传质效率不佳。在今后的微生物电化学系统的运行中,可以试图提高反应器的传质效率进而提高目标产物的生成。该反应器的能量传递效率相对传质效率较高,这也是由于微生物电解池提供相应电子流驱动力的原因。在不进行搅拌和曝气条件下,MEC

的能量传递效率高于其他厌氧发酵系统,其中一部分归因于电化学系统自身或外加的电势差导致的能量传递效率略高^[41]。与实验结果相吻合的 η (0.2)与 ε (0.5)被用于之后的模拟种间互动力学的研究。

本模拟中获取的 MEC 催化动力学数据还不够全面,如果能够分析并设置 MEC 中电极的全部催化动力学参数,对模拟输出会有更好的匹配结果。稳定运行之后的四类主要功能菌群相对丰度的 16S rRNA 基因测序结果与 MAS 结果比较(发酵产氢菌被归为发酵菌)发现,16S rRNA 基因测序结果发酵细菌的分类鉴定信息比 MAS 预测的结果更加精细。MAS 预测的种群相对丰度与实验结果相似,种群丰度相对略低于 16S rRNA 基因高通量测序结果。可能由于已报道的热力学与动力学参数有限,因此需要对 MEC 热力学与动力学进一步研究。实验中通过将系统中可能存在的生化反应归类之后,将动力学与热力学相结合,但仍可能存在未知生化反应和

参数没有被考虑。例如, 剩余污泥絮体或颗粒存在大量多糖、蛋白质和腐殖酸等胞外聚合物, 由于成分比较复杂, 大量有机物转化过程的热力学与动力学参数不清楚。这些因素都可能导致模拟结果与实际微生物群落结构存在偏差。因此, 对污泥胞外聚合物和水解污泥的主要组分进行分类后, 补充相应热力学与动力学参数, 可以对污泥水解过程进行模拟。尽管 MAS 数据可进一步用于主要微生物种间相互作用及动力学预测研究, MAS 中的参数设置仍需要 16S rRNA 基因高通量测序数据相互验证和优化。

本实验结果表明产甲烷菌与乙酸产氢菌和以丙酸为电子供体的电活性菌在反应系统中共存。这可能解释为什么丙酸产电比乙酸产电具有更高的 $\Delta_r G$ 和 \hat{E} 。随着反应器运行周期增加, 乙酸被电活性细菌消耗的速率加快, 乙酸产甲烷菌和丙酸为电子供体的电活性细菌逐渐被富集。长期模拟结果与 Ishii 等^[42]一致, 即产氢过程逐渐被产甲烷过程取代。可见, 通过模拟不同功能群(Guild)对不同电子供体的电子捕获能力的分析, 可以为微生物电化学系统的目标产物的定向调控和种群优化提供新的策略。

从电子流网络分析表明丙酮酸、乙酸和丙酸是主要的电子供体, 其电子流主要流向电发酵微生物与产甲烷微生物, 还有一部分流向厌氧发酵微生物。电子流主要集中的位置显示甲烷主要是由产甲烷菌与电极协同作用产生, 且产甲烷菌的自身作用占主导, 这与之前报道的 MEC 产甲烷是由产甲烷微生物与电催化共存的结果稍有差异^[42], 这也可能是由于阴极表面产甲烷的热力学动力学数据不够精确导致的。本研究表明 MAS 具有一定的动态模拟能力, 可以对生态群落的动态变化进行模拟。通过与大量高通量测序技术研究的结合, 可以不断调整参数设置改善模拟预测水平。验证后的 MAS 可以在相同的条件下, 通过不同的环境参数预测不同环境条件下的系统性能和生物群落结构。Netlogo 软件上开发的 MAS 可以根据用户的具体研究范围和系统进行参数的设定。因此, 如果我们建立不同

功能群或种群的化学计量及其热力学和动力学参数数据库, 可提高对人工和自然环境中微生物群落及种群互作关系的模拟能力。

综上所述, 基于多 Agent 仿真解析剩余污泥处理微生物电解池的种群互作研究, 通过对能量传递效率与传质效率的正交试验, 确立了 MEC 反应器在设定运行下的能量传递效率与传质效率。MAS 结合热力学与动力学参数, 模拟了稳定运行下的 MEC 阳极生物膜的群落以乙酸产甲烷菌与丙酸电活性细菌为优势种群, 并与实验结果大致吻合, 说明 MAS 的模拟可以预测微生物的群落动态, 并进行实时监测。推测电活性细菌胞外传递的电子可能改变了系统的动力学与热力学反应。在 MEC 反应过程中乙酸盐作为一级诱导底物优先被电活性细菌和产甲烷菌利用。当 MEC 长期运行, 乙酸氧化菌被大量富集后, 乙酸被快速消耗, 此时, 电活性细菌和产氢产乙酸菌可以进一步利用丙酸作为电子供体, 因此 MEC 稳定运行后没有发生丙酸积累。模拟不同生态条件(电子供体种类及其不同比例、有机负荷和营养条件等)对 MEC 性能和电活性生物膜群落结构的影响, 可为 MEC 的稳定运行和定向调控提供指导。研究结果表明多 Agent 仿真为微生物群落结构动态研究提供了一种新的方法。

REFERENCES

- [1] Li W, Yu NJW, Fang AR, et al. Co-treatment of potassium ferrate and ultrasonication enhances degradability and dewaterability of waste activated sludge[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2019, 361: 148-155
- [2] Liu Q, Ren ZJ, Huang C, et al. Multiple syntrophic interactions drive biohythane production from waste sludge in microbial electrolysis cells[J]. *Biotechnology for Biofuels*, 2016, 9: 162
- [3] Wang H, Li F, Zhang YP, et al. Research progress in materialization and energy utilization of the surplus sludge of sewage treatment[J]. *Materials Review*, 2016, 30(13): 119-124 (in Chinese)
王鹤, 李芬, 张彦平, 等. 污水厂剩余污泥材料化和能源利用技术研究进展[J]. *材料导报*, 2016, 30(13): 119-124
- [4] Park JH, Park JH, Seong HJ, et al. Metagenomic insight into methanogenic reactors promoting direct interspecies electron transfer via granular activated carbon[J]. *Bioresource Technology*, 2018, 259: 414-422
- [5] Stams AJM, Plugge CM. Electron transfer in syntrophic

- communities of anaerobic bacteria and archaea[J]. *Nature Reviews Microbiology*, 2009, 7(8): 568-577
- [6] Thiele JH, Zeikus JG. Control of interspecies electron flow during anaerobic digestion: significance of formate transfer versus hydrogen transfer during syntrophic methanogenesis in flocs[J]. *Applied and Environmental Microbiology*, 1988, 54(1): 20-29
- [7] Stams AJM, de Bok FAM, Plugge CM, et al. Exocellular electron transfer in anaerobic microbial communities[J]. *Environmental Microbiology*, 2006, 8(3): 371-382
- [8] Blumensaat F, Keller J. Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA anaerobic digestion model No. 1 (ADM1)[J]. *Water Research*, 2005, 39(1): 171-183
- [9] Cioffi-Revilla C. Comparing agent-based computational simulation models in cross-cultural research[J]. *Cross-Cultural Research*, 2011, 45(2): 208-230
- [10] Liang Q, Zhuang HC, Lu MJ, et al. Multi-agent simulation regulated by microbe-oriented thermodynamics and kinetics equations for exploiting interspecies dynamics and evolution between methanogenesis, sulfidogenesis, hydrogenesis and exoelectrogenesis[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2019, 366: 573-581
- [11] Thober J, Schwarz N, Hermans K. Agent-based modeling of environment-migration linkages: a review[J]. *Ecology and Society*, 2018, 23(2): 41
- [12] Utomo DS, Onggo BS, Eldridge S. Applications of agent-based modelling and simulation in the agri-food supply chains[J]. *European Journal of Operational Research*, 2018, 269(3): 794-805
- [13] Oyetunde T, Sarma PM, Ahmad F, et al. A multiple reaction modelling framework for microbial electrochemical technologies[J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2017, 18(1): 86
- [14] McCarty PL, Bae J. Model to couple anaerobic process kinetics with biological growth equilibrium thermodynamics[J]. *Environmental Science & Technology*, 2011, 45(16): 6838-6844
- [15] Morimoto T, Kobayashi S, Nagao Y, et al. Learning curve constraint cell automaton model for the lean production of CFRP airframe components[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2016, 84(9/12): 2127-2137
- [16] Pogson M, Smallwood R, Qwarnstrom E, et al. Formal agent-based modelling of intracellular chemical interactions[J]. *Biosystems*, 2006, 85(1): 37-45
- [17] Wolfram S. Cellular automata as models of complexity[J]. *Nature*, 1984, 311(5985): 419-424
- [18] Sun R, Xing DF, Jia JN, et al. Methane production and microbial community structure for alkaline pretreated waste activated sludge[J]. *Bioresource Technology*, 2014, 169: 496-501
- [19] Himmi EH, Bories A, Boussaid A, et al. Propionic acid fermentation of glycerol and glucose by *Propionibacterium acidipropionici* and *Propionibacterium freudenreichii* ssp. *shermanii*[J]. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 2000, 53(4): 435-440
- [20] Ha SR, Lee DH, Lee SE. A mathematical model for the anaerobic digestion process applied to a mixture of night soil and septic tank sludge[J]. *Water Science and Technology*, 1986, 18(7/8): 239-248
- [21] Kalyuzhnyi SV, Fedorovich VV. Mathematical modelling of competition between sulphate reduction and methanogenesis in anaerobic reactors[J]. *Bioresource Technology*, 1998, 65(3): 227-242
- [22] Tuo Y, Liu GF, Zhou JT, et al. Microbial formation of palladium nanoparticles by *Geobacter sulfurreducens* for chromate reduction[J]. *Bioresource Technology*, 2013, 133: 606-611
- [23] Ahring BK, Westermann P. Kinetics of butyrate, acetate, and hydrogen metabolism in a thermophilic, anaerobic, butyrate-degrading triculture[J]. *Applied and Environmental Microbiology*, 1987, 53(2): 434-439
- [24] Gibson GR, Cummings JH, Macfarlane GT. Competition for hydrogen between sulphate-reducing bacteria and methanogenic bacteria from the human large intestine[J]. *Journal of Applied Bacteriology*, 1988, 65(3): 241-247
- [25] Das D, Veziroglu TN. Hydrogen production by biological processes: a survey of literature[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2001, 26(1): 13-28
- [26] Mu Y, Wang G, Yu HQ. Kinetic modeling of batch hydrogen production process by mixed anaerobic cultures[J]. *Bioresource Technology*, 2006, 97(11): 1302-1307
- [27] Rebac S, Gerbens S, Lens P, et al. Kinetics of fatty acid degradation by psychrophilically grown anaerobic granular sludge[J]. *Bioresource Technology*, 1999, 69(3): 241-248
- [28] Tayà C, Guerrero J, Vanneste G, et al. Methanol-driven enhanced biological phosphorus removal with a syntrophic consortium[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2013, 110(2): 391-400
- [29] DeLeon ER, Stoy GF, Olson KR. Passive loss of hydrogen sulfide in biological experiments[J]. *Analytical Biochemistry*, 2012, 421(1): 203-207
- [30] Rudolph B, Hansen T, Schönheit P. Glucose-6-phosphate isomerase from the hyperthermophilic archaeon *Methanococcus jannaschii*: characterization of the first archaeal member of the phosphoglucose isomerase superfamily[J]. *Archives of Microbiology*, 2004, 181(1): 82-87
- [31] Ghigliazza R, Lodi A, Rovatti M. Kinetic and process considerations on biological reduction of soluble and scarcely soluble sulfates[J]. *Resources, Conservation and Recycling*, 2000, 29(3): 181-194
- [32] Kaksonen AH, Plumb JJ, Robertson WJ, et al. The performance, kinetics and microbiology of sulfidogenic fluidized-bed treatment of acidic metal- and sulfate-containing wastewater[J]. *Hydrometallurgy*, 2006, 83(1/4): 204-213
- [33] Luo X, Gleisner R, Tian S, et al. Evaluation of mountain beetle-infested lodgepole pine for cellulosic ethanol production by sulfite pretreatment to overcome recalcitrance of lignocellulose[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, 49(17): 8258-8266
- [34] Rzczycka M, Błaszczuk M. Growth and activity of sulphate-reducing bacteria in media containing phosphogypsum and different sources of carbon[J]. *Polish Journal of Environmental Studies*, 2005, 14(6): 891-895
- [35] Fawdry RM. Radiolysis of 2-[¹⁸F] fluoro-2-deoxy-D-glucose (FDG) and the role of reductant stabilisers[J]. *Applied Radiation and Isotopes*, 2007, 65(11): 1193-1201
- [36] Soriano A, Cowan JA. Sulfite reductase: active site residues are

- “noncatalytic”. comparison of reaction energetics for enzyme- and siroheme-catalyzed reduction of inorganic substrates[J]. Journal of the American Chemical Society, 1995, 117(16): 4724-4725
- [37] Klok JBM, de Graaff M, van den Bosch PLF, et al. A physiologically based kinetic model for bacterial sulfide oxidation[J]. Water Research, 2013, 47(1): 483-492
- [38] Ozgun H. Anaerobic digestion model No. 1 (ADM1) for mathematical modeling of full-scale sludge digester performance in a municipal wastewater treatment plant[J]. Biodegradation, 2019, 30(1): 27-36
- [39] Jaxa-Rozen M, Kwakkel JH, Bloemendal M. A coupled simulation architecture for agent-based/geohydrological modelling with NetLogo and Modflow[J]. Environmental Modelling & Software, 2019, 115: 19-37
- [40] Yin CK, Shen YW, Yuan RX, et al. Sludge-based biochar-assisted thermophilic anaerobic digestion of waste-activated sludge in microbial electrolysis cell for methane production[J]. Bioresource Technology, 2019, 284: 315-324
- [41] Liu WZ, Wang L, Gao L, et al. Hydrogen and methane production in bioelectrochemical system: biocathode structure and material upgrading[A]//Mohan SV, Varjani S, Pandey A. Microbial Electrochemical Technology[M]. Amsterdam: Elsevier, 2019: 921-953
- [42] Ishii S, Suzuki S, Norden-Krichmar TM, et al. Functionally stable and phylogenetically diverse microbial enrichments from microbial fuel cells during wastewater treatment[J]. PLoS One, 2012, 7(2): e30495

征 稿 简 则

1 刊物简介与刊登内容

《微生物学通报》是由中国科学院微生物研究所和中国微生物学会主办,以微生物学应用基础研究及技术创新与应用为主的综合性学术期刊。本刊为月刊,中文核心期刊,中国科技核心期刊,CSCD 核心期刊,曾获国家优秀科技期刊三等奖,中国科学院优秀科技期刊三等奖,并在新闻出版署设立的“中国期刊方阵”中被列为“双效”期刊。从 2012 年至今,本刊以国内“微生物、病毒学类期刊”综合评价总分第一而蝉联“百种中国杰出学术期刊奖”,并入选 300 种“中国精品科技期刊”,成为“中国精品科技期刊顶尖学术论文(F5000)”项目来源期刊。

本刊刊登内容包括:工业、海洋、环境、基础、农业、食品、兽医、水生、药物、医学微生物学和微生物蛋白质组学、功能基因组、工程与药物等领域的最新研究成果、产业化新技术和新进展,以及微生物学教学研究改革等。设置的栏目有:研究报告、专论与综述、生物实验室、高校教改纵横、专栏等。

2 投稿方式

投稿时请登陆我刊主页 <http://journals.im.ac.cn/wswxtbcn>, 点击作者投稿区,第一次投稿请先注册,获得用户名和密码,然后依照提示提交稿件,详见主页“投稿须知”。

3 写作要求

3.1 来稿要求论点明确,数据可靠,简明通顺,重点突出。

3.2 英文摘要写作注意事项:(1) 建议使用第一人称,以此可区分研究结果是引用文献还是作者所得;(2) 建议用主动语态,被动语态表达拖拉模糊,尽量不用,这样可以避免长句,以求简单清晰;(3) 建议使用过去时态,要求语法正确,句子通顺;(4) 英文摘要的内容应与中文摘要一致,但可比中文摘要更详尽,写完后务必请英文较好且专业知识强的专家审阅定稿后再投稿;(5) 摘要中不要使用缩写语,除非是人人皆知的,如:DNA、ATP 等;(6) 在英文摘要中不要使用中文字体标点符号。

3.3 关键词:应明确、具体,一些模糊、笼统的词语最好不用,如“基因”“表达”等。

(下转 p.2019)