

DOI: 10.11766/trxb202505120216

CSTR: 32215.14.trxb202505120216

陈晓薇, 李雪莹, 杨晓帆. 多孔介质中生物膜生长过程建模与数值模拟研究进展[J]. 土壤学报, 2026, 63 (5): 1424–1448.

CHEN Xiaowei, LI Xueying, YANG Xiaofan. Research Progress in Numerical Modeling and Simulation of Biofilm Growth in Porous Media[J].

Acta Pedologica Sinica, 2026, 63 (5): 1424–1448.

多孔介质中生物膜生长过程建模与数值模拟研究进展*

陈晓薇^{1, 2}, 李雪莹^{1, 2}, 杨晓帆^{1, 2†}

(1. 北京师范大学珠海校区, 广东海陆交互带人地耦合系统野外科学观测研究站, 广东珠海 519087; 2. 北京师范大学地理科学学部, 地表过程与水土风沙灾害风险防控全国重点实验室, 北京 100875)

摘 要: 多孔介质中生物膜的生长演化涉及复杂的物理-化学-生物耦合过程, 其显著的多尺度特性、介质非均质性以及模型参数的不确定性, 导致不同尺度数值模型的理论体系存在本质差异, 这为生物膜动态行为的精确刻画与预测带来了严峻挑战。近年来, 基于孔隙尺度、连续介质尺度和跨尺度耦合的生物膜生长过程建模和数值模拟研究取得了重要突破, 但在模型构建、验证和应用方面仍存在诸多瓶颈问题, 主要包括三维微观孔隙结构表征困难、生物膜生长动力学过程模型构建复杂、跨尺度-多过程耦合策略量化标准缺失、模型参数化方案所需的实验数据稀缺等。综上, 本文基于多孔介质内生物膜生长动力学过程机理, 梳理了孔隙尺度、连续介质尺度和多尺度耦合数值模型的研究进展, 解析了不同尺度生物膜生长模型的理论基础、数值算法、应用算例、适用范围和局限性, 总结了三维成像技术的应用潜力、生物膜演化全过程的表征趋势, 以及跨尺度耦合建模策略的优化路径。本综述为多孔介质中生物膜生长模型的优选与改进提供了理论依据, 为土壤微生物技术在环境污染治理和生态修复等领域的工程化应用提供了技术支撑。

关键词: 多孔介质; 生物膜生长; 土壤微生物; 数值模拟

中图分类号: S154.31, P66, X53 **文献标志码:** A

Research Progress in Numerical Modeling and Simulation of Biofilm Growth in Porous Media

CHEN Xiaowei^{1, 2}, LI Xueying^{1, 2}, YANG Xiaofan^{1, 2†}

(1. Guangdong Provincial Observation and Research Station for Coupled Human and Natural Systems in Land-Ocean Interaction Zone, Beijing Normal University at Zhuhai, Zhuhai, Guangdong 519087, China; 2. State Key Laboratory of Earth Surface Processes and Disaster Risk Reduction, Faculty of Geographical Science, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract: The growth and evolution of biofilms in porous media involve complex coupled physicochemical and biological processes. Their pronounced multi-scale characteristics, heterogeneity of the media, and uncertainties in model parameterization have led to fundamental divergences in the theoretical frameworks of numerical models across different scales. This poses

* 国家自然科学基金项目 (42477214) 和广东海陆交互带人地耦合系统野外科学观测研究站项目 (2024B1212040003) 资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 42477214) and the Guangdong Provincial Observation and Research Station for Coupled Human and Natural Systems in Land-Ocean Interaction Zone (No.2024B1212040003)

† 通讯作者 Corresponding author, E-mail: xfyang@bnu.edu.cn

作者简介: 陈晓薇 (2000—), 女, 硕士研究生, 主要从事多孔介质中反应性溶质运移数值模拟研究。E-mail: cxw_beijing@163.com

收稿日期: 2025–05–12; 收到修改稿日期: 2025–05–26; 网络首发日期 (www.cnki.net): 2026–05–08

significant challenges for the accurate characterization and prediction of biofilm dynamics. In recent years, advances in computational techniques have driven substantial progress in pore-scale, continuum-scale, and cross-scale coupled numerical modeling and simulation of biofilm growth. However, considerable bottlenecks remain in model development, validation, and utilization. These include difficulties in characterizing three-dimensional microscopic pore structures, the complexity of constructing biofilm growth dynamics models, the lack of quantitative standards for cross-scale multiprocess coupling strategies, and the scarcity of experimental data required for model parameterization. Based on the mechanisms of biofilm growth dynamics in porous media, this paper reviews the research progress of pore-scale, continuum-scale, and multi-scale coupling numerical models, analyzes the theoretical foundations, numerical algorithms, application cases, applicability, and limitations of biofilm growth models at different scales. It also summarizes the application potential of three-dimensional imaging technologies, outlines the emerging trends in mechanistic representation of the complete biofilm growth processes, and explores the optimization pathways for cross-scale coupling modeling strategies. This review provides a theoretical basis for the selection and improvement of biofilm growth models, and offers technical support for the engineering application of soil microbial technologies in environmental pollution control and ecological restoration.

Key words: Porous media; Biofilm growth; Numerical model; Soil microorganisms

生物膜是附着在多孔介质表面,通过胞外聚合物(extracellular polymeric substances, EPS)聚集在一起的微生物细胞群^[1-4],广泛存在于土壤、地下水等自然环境中^[5-9]。生物膜的动态行为既由流体流动、溶质运移与生物膜生长之间的复杂耦合作用驱动,又受微生物与环境之间的复杂耦合机制调控,其演化过程涉及微生物定植与团聚、EPS 生长、生物膜稳定与脱落 5 个关键过程^[8-11](图 1),具体表现为以下五个阶段:(1)细菌细胞在介质表面定植;(2)细胞团聚并分泌 EPS,构建生物膜空间结构;(3)细胞利用营养物质增殖,驱动 EPS 生长;(4)营养物质扩散、细胞摄取及代谢达到动态平衡后,细

菌细胞形成稳定 EPS 包裹的菌落结构;(5)稳定成熟的 EPS 在高剪切力或底物限制等条件下,局部区域发生生物膜脱落。在土壤含水层等天然多孔介质中^[3-4],生物膜的形成、生长与演化过程显著影响污染物吸附和降解^[12-13]、溶质反应迁移^[14-16]、孔隙率及渗透性^[17]等,进而在土壤和地下水污染的微生物修复以及二氧化碳的微生物矿化等领域展现出了重要的应用价值^[18-23]。因此,准确表征生物膜生长的动力学机理,是定量描述生物膜动态行为、解析其与流体流动及溶质运移之间耦合机制的关键挑战,也是优化土壤微生物技术实际应用效果的重要前提。

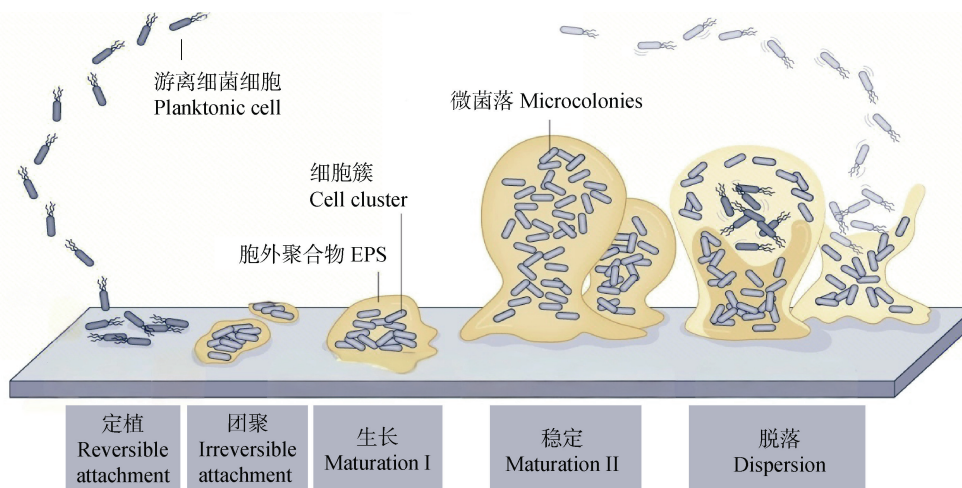


图 1 多孔介质中生物膜生长过程(改编自文献[7])

Fig. 1 Biofilm growth in porous media (adapted from reference [7])

近年来,建模与数值模拟已成为描述多孔介质中生物膜动态行为的有效方法。通过构建不同尺度下的生物膜生长数值模型,可深入解析孔隙结构对微生物行为的影响,刻画流体流动-溶质反应迁移-生物膜生长之间的复杂耦合过程,模拟并预测复杂多孔介质中的生物膜演化动态行为,进而有效优化土壤微生物技术的实际应用效果。然而,现有模型在生物膜生长动力学机理的刻画方面仍需改进,尤其是在微生物定植与团聚、EPS 生长、生物膜稳定与脱落动态行为的描述方面。其主要原因可归结为以下 4 个方面:复杂互馈关系表征不足、多尺度特征、不确定性特征及多孔介质非均质性特征^[2, 4, 6, 9, 15, 24]。首先,生物膜动态行为与多孔介质孔隙结构特征(孔隙大小和形状^[4, 6]、连通性^[4]等)及环境条件(pH^[2]、温度^[9]、营养物质浓度^[4]等)之间存在着高度非线性、动态变化的互馈关系。例如,低 pH 环境能够增强 EPS 对高岭石等矿物的吸附作用,改变生物膜空间结构,进而调控孔隙度与渗透性,最终影响生物膜生长速率及营养物质扩散过程^[2, 9]。同时,生物膜的生长能够改变局部化学环境,其持续生长会进一步改变营养物质浓度场和孔隙结构^[4]。而这一复杂互馈关系难以用基于理想假设的动力学特征方程充分描述^[24]。其次,自然界中的生物膜行为涉及流体流动、溶质运移与内在生长机理的复杂耦合,并具有明显的多尺度特征^[24];再次,上述复杂互馈关系和

多尺度特征导致模型参数化具有高度不确定性,使得生物膜动态行为的定量描述极具难度^[25-26];此外,生物膜生长显著增加了多孔介质的非均质性,使得模型对流体流动、溶质运移的刻画更为困难^[24, 27-30]。

已有研究多聚焦于孔隙尺度和连续介质尺度上的生物膜生长行为(图 2),并开发了不同尺度的生物膜生长数值模型,包括孔隙尺度模型、连续介质尺度模型和多尺度耦合模型。其中,孔隙尺度模型通过直接求解微观孔隙内的纳维-斯托克斯(Navier-Stokes, N-S)方程、对流-扩散方程(convection-diffusion equation, CDE)以及与生物膜生长相关的反应动力学方程,是解析多孔介质中生物膜生长微观机理的重要手段^[26, 31];但其受限于高昂的计算成本,难以推广至较大尺度。连续介质尺度模型基于表征单元体(representative elementary volume, REV)假设,采用参数化方法简化了异质性孔隙结构、完整生长机理和复杂微观相互作用,进而能够在连续介质尺度上描述生物膜的动态演化^[32];但其难以精细刻画基质-生物膜-流体的局部相互作用^[33-35],无法考虑微观过程。多尺度模型旨在综合孔隙尺度和连续介质尺度模型优点的同时,弥补二者的局限性,构建能够有效整合微观异质性与宏观输运过程之间相互作用的数学框架,并在此基础上提高模型模拟精度与适用性^[36-38]。目前,多尺度模型主要基于 Darcy-Brinkman-Stokes(DBS)框架或使用域分解

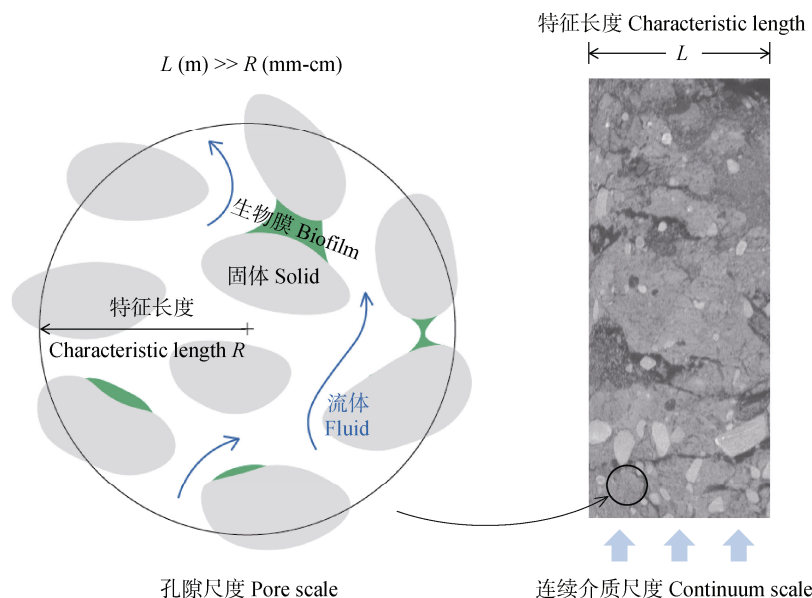


图 2 多孔介质中孔隙尺度与连续介质尺度的生物膜分布示意图(改编自文献[24])

Fig. 2 Schematic diagram of biofilm distribution at pore scale and continuum scale (adapted from reference [24])

方法 (domain decomposition method, DDM) [24] 构建。此类模型发展的主要桎梏是建立微观-宏观耦合模型框架和参数升尺度, 保证微观-宏观信息传递的稳定性与准确性, 进而决定了多尺度模型的通用性、可拓展性与工程应用潜力 [24]。总之, 尽管从孔隙、连续介质尺度以及多尺度耦合角度, 多孔介质中生物膜生长过程的建模和数值模拟研究已取得了显著进展, 但现有模型研究多局限于某一类尺度模型的改进与应用, 缺乏对不同尺度模型的综合阐述与对比分析, 从而严重制约了生物膜生长数值模型的创新发展。因此, 亟需基于生物膜生长动力学机理, 系统回顾不同尺度模型的理论框架、数值算法、应用算例与局限性, 进一步总结和确定生物膜生长数值模型的未来发展方向。

基于此, 本文系统梳理了多孔介质中生物膜生长数值模型的最新进展, 并通过对比不同尺度模型的理论框架与应用场景, 探讨不同数值模型面临的挑战及其解决方案, 为生物膜生长模型的优选与改进提供理论依据。本文的其余部分如下: 第 2 节综合阐述了不同尺度模型的理论框架, 并进一步分析了模型的核心优势、局限性与优化方向; 第 3 节针对不同尺度模型的关键挑战, 系统回顾了已有研究的解决方案及其应用效果; 第 4 节总结了不同尺度模型的发展现状、关键挑战与未来机遇。

1 孔隙尺度生物膜生长过程建模与数值模拟

1.1 多孔介质中生物膜生长的数值模型

已有学者基于微流控等实验方法, 针对多孔介质中的生物膜生长过程开展了机理研究 [7, 39-45], 并发现孔隙结构的几何形态、流体剪切力以及营养物质的局部分布均会显著影响微生物的动态行为 [30, 46]。然而, 这类实验研究由于缺乏数值模拟的验证与进一步分析, 难以定量解析生物膜生长过程中的微观机制, 同时无法准确预测孔隙结构内生物膜的动态行为 [30, 46]。因此, 为突破相关实验的局限性, 亟需开展孔隙尺度生物膜生长建模和数值模拟研究。

孔隙尺度模型通过直接解析孔隙结构及其动态演化、流体流动与溶质运移过程, 为研究生物膜演化动态行为提供了高精度的数值模拟工具 [47-48]。这类模型的核心优势在于能够精确刻画微生物定植与

团聚、EPS 生成与脱落等微观行为, 并实现多孔介质中微观耦合过程的定量描述。值得注意的是, 生物膜生长与流体流动、溶质运移之间存在复杂的互馈关系。例如, 生物膜积累改变了孔隙结构, 影响了流场、压力场、浓度场等 [4]; 流速变化也改变了局部剪切应力以及底物分布, 从而调控了生物膜生长等动态行为以及空间分布 [2, 9]。因此, 多孔介质中的生物膜生长过程模型必须耦合流体流动与溶质运移, 才能完整表征多孔介质中的生物膜动态行为。在孔隙尺度, 这类模型通常采用不可压缩 N-S 方程描述流体流动, 采用 CDE 方程描述溶质反应迁移, 并结合生物膜生长反应动力学方程刻画生物膜微观行为 [24], 其数值模型概念图与求解流程图如图 3 所示, 其数学表达式为:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C + R \quad (3)$$

式中, $\mathbf{u}$ ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$) 为流体速度矢量, t (s) 为时间, ρ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) 为流体密度, p (Pa) 为压力, μ ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) 为黏度, C ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) 为溶质浓度, D ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) 为分子扩散系数, R 为反应源项 [14, 49]。具体而言, 在式 (2) 中, 从左至右依次为瞬态项 ($\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$)、

对流项 ($\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$)、压力梯度项 ($-\frac{1}{\rho} \nabla p$) 和扩散项 (或黏性项) ($\mu \nabla^2 \mathbf{u}$) [14, 49]。而在式 (3) 中, 从左至右依次为瞬态项 ($\frac{\partial C}{\partial t}$)、对流项 ($\mathbf{u} \cdot \nabla C$)、扩散项 ($D \nabla^2 C$) 和表征生物膜生长的反应源项 (R)。在孔隙尺度生物膜生长建模方面, 相关研究重点关注微生物附着、EPS 生长、脱落等关键机理, 并通过设置反应源项 (R) 反映生物膜生长与流体流动、溶质运移之间的复杂耦合作用。其中, 已有研究多采用 Monod 动力学方程 [49-50] 表示 R , 其数学表达式为:

$$R = k \frac{C}{K_m + C} \quad (4)$$

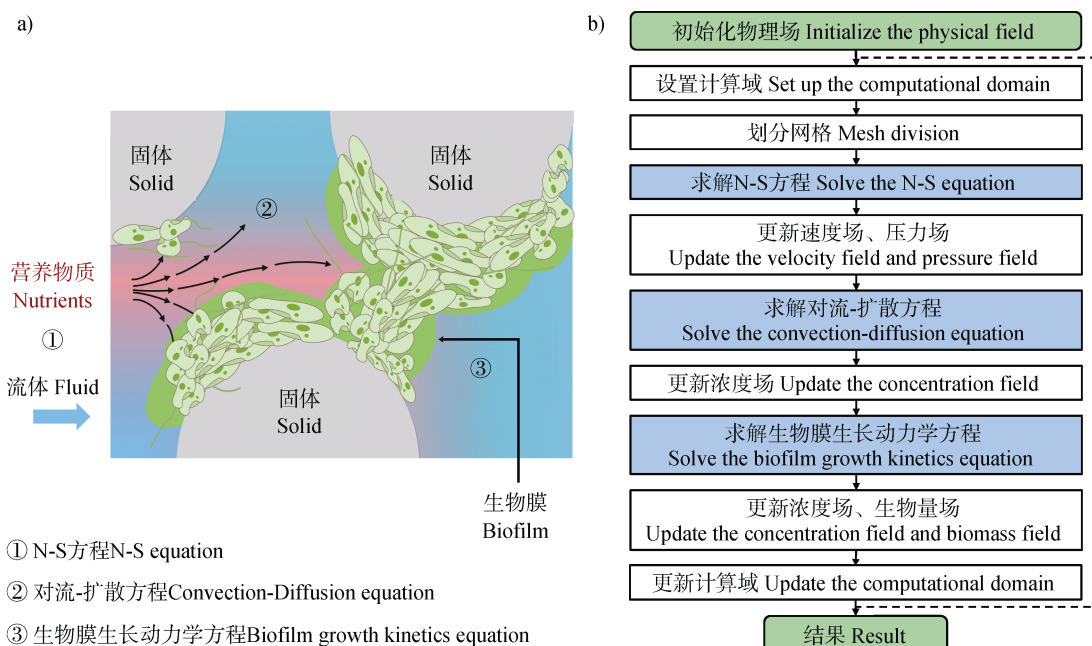


图 3 孔隙尺度生物膜生长数值模型概念图 (a) (改编自文献[16]) 和求解流程图 (b)

Fig. 3 Conceptual diagram of pore-scale biofilm growth numerical model (a) (adapted from reference [16]) and solving flowchart (b)

式中, k ($\text{kg} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-3}$) 为最大反应速率 (或生物膜对溶质的最大消耗速率), K_m ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) 为 Monod 半饱和常数。式 (4) 是量化流体-溶质-生物膜之间复杂耦合关系的关键, 但这一基础公式无法刻画涉及微生物定植与团聚、EPS 生长、生物膜稳定与脱落的完整生物膜生长过程。因此, 已有研究通过引入胶体过滤理论 (classical colloid filtration theory, CFT) 框架并修正碰撞概率方程^[51]、耦合 Haldane 动力学方程^[52]等方法, 扩展了模型准确表征生物膜生长机理的能力, 为完整刻画生物膜生长过程提供了有效途径。

针对孔隙尺度生物膜生长建模与数值模拟, 已有方法大致可以分为直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS) 和孔隙网络模型 (pore-network model, PNM) 两类。其中, PNM 使用理想化的孔隙-喉道拓扑网络简化了复杂孔隙结构, 通过耦合生物膜生长反应动力学方程 (通常采用 Monod 动力学方程)、溶质运移方程和流体流动方程, 描述多孔介质中的微生物动态行为与孔隙尺度演化特征。例如, Qin 和 Hassanizadeh^[17]将孔隙空间近似为规则晶格, 利用 Hagen-Poiseuille 方程 (N-S 方程的层流稳态圆管解析解) 计算了喉道流动, 并成功应用 PNM 解析了生物膜生长对渗透率的影响机制。但是, 由于

PNM 简化了孔喉结构, 导致其对流体流动、溶质运移过程的计算精度较低^[53]。因此, 在需要更高精度模拟的情况下, 如精确模拟孔隙结构动态演变时, 学者们更倾向于采用 DNS^[54], 直接求解孔隙几何内的流动与溶质运移过程。对于孔隙尺度的生物膜生长数值模拟, 已有研究主要采用格子玻尔兹曼方法 (lattice boltzmann method, LBM)^[48-49]和计算流体动力学 (computational fluid dynamics, CFD) 方法^[15]。其中, LBM 具有在规则网格上离散化复杂边界形状的优点, 而 CFD 在高精度刻画孔隙结构、捕捉流场细节方面更具优势^[24]。例如, Pintelon 等^[49]基于 LBM, 精确模拟了生物膜渗透性对多孔介质中生物堵塞的作用; Perez 等^[15]则采用 CFD 方法构建了孔隙尺度多物理场耦合模型, 重点分析了生物膜诱导流场非均质性对溶质运移行为的影响。

近年来, 孔隙尺度模型在揭示生物膜生长、溶质运移及孔隙结构动态变化等方面均取得了重要突破, 但这类模型仍存在一定的局限性, 主要表现为理想化表征真实孔隙结构, 以及简化表征生物膜生长动力学机理, 因此难以准确描述微生物定植与团聚、多底物竞争、EPS 生成以及剪应力诱导的局部脱落等复杂微观过程。对于真实孔隙结构的理想化表征, 近年来 X 射线计算机断层扫描 (X-ray computed

tomography, XCT)^[55-56]、磁共振成像(magnetic resonance imaging, MRI)^[57]等三维成像技术的发展,可高分辨率识别并解析微米甚至纳米尺度孔隙结构的几何特征^[40],为孔隙结构的精细表征提供了重要支持。然而,现有孔隙尺度模型多采用规则排列的圆柱体等二维切片或孔隙网络结构,无法高精度表征天然多孔介质中复杂的孔隙结构,进而难以准确描述孔隙结构内生物膜行为的动态特征。因此,未来需在孔隙尺度数值模拟中引入高分辨率三维成像结果,建立基于真实孔隙结构的孔隙尺度建模方法。

而对于生物膜生长机理的简化表征,已有研究有以下几类方案:(1)引入基于经典CFT的数值模型,为微生物定植行为的动态表征提供新思路。例如,Nelson^[58]基于CFT修正了Yao-Habibian-O'Melia(YHO)方程^[59],构建了一个Lagrangian轨迹分析模型,进而系统研究了微生物在多孔介质中的运移与定殖机制。研究通过对比RT模型模拟结果与Smoluchowski-Levich扩散项解析解完成了模型验证工作,并在此基础上精细刻画了微生物运移与定植行为,成功再现了柱实验中观察到的滞留颗粒空间分布特征。Bozorg等^[51]同样基于CFT构建了一个孔隙尺度数值模型,并通过修正碰撞概率方程,重点分析了生物膜覆盖对微生物定植过程的动态影响。研究通过对比模型模拟与柱实验所观察到的微生物空间分布特征,证实了扩散主导时模型模拟的准确性,并进一步揭示了介质表面生物膜对微生物定植概率的增强效应。然而,这类研究多局限于初始成膜过程的数值模拟,无法全面刻画生物膜生长动态过程。(2)引入基于细胞个体的模型,提升对微生物定植与EPS生成过程的表征能力。例如,Jung和Meile^[60]基于元胞自动机方法描述了细胞在固-液界面上的生长、移动与占据行为,结合体积分函数模拟了孔隙结构的动态演化,为微生物个体行为的建模提供了有效方案。Lohrmann和Holm^[61]同样结合基于个体模型(individual-based model, IbM)模拟了微观细菌行为,使用Langevin动力学描述了细菌布朗运动,并基于随机附着概率划定了微生物定植与否的标准。通过细胞轨迹与吸附分布对比实验,该研究验证了模型在捕捉细胞黏附趋势方面的准确性,进一步为微生物定植行为的建模提供了有力工具。但研究并未考虑营养物质的摄取过程,后续该模型可进一步耦合营养物质的迁移行为。(3)

考虑(多)底物摄取行为,增强对微生物代谢过程的表征能力。Aminnaji等^[52]针对非水相液体(nonaqueous phase liquids, NAPL)污染环境中生物膜生长与污染物降解的交互作用机制,构建了耦合NAPL分布、溶质运移与生物降解过程的PNM。研究引入Haldane动力学方程描述了细菌对溶解氧和碳源的摄取行为,并通过对比模拟结果与文献数据,验证了多底物设定在捕捉降解效率变化方面的有效性。该模型能够精确描述多底物扩散与微生物摄取过程,但无法刻画微生物定植与生物膜脱落行为。(4)引入力学反馈机制,强化对生物膜脱落行为的模拟能力。例如,Kurz等^[50]耦合Biot方程,构建了二维可变形生物膜生长数值模型。研究通过微流控实验获取了生物膜结构演化图像,并将其与模拟结果对比,证明了该模型可准确再现生物膜诱导的优先流通道间歇演化行为,为捕捉局部脱落行为提供了技术支持。然而,该模型依旧简化了生物膜生长的动力学机制,省略了EPS生成这一关键过程,忽视了底物消耗与代谢产物生成之间的耦合作用。(5)结合实验数据,实现更为精确的生物膜生长过程数值模拟。Perez等^[15]针对生物膜诱导的流场非均质性对溶质运移行为的影响,基于实验获取的生物膜结构反演了局部孔隙率,并使用孔隙尺度模型刻画了孔隙结构的动态演化,描述了生物膜的体积增长过程。但该研究并未考虑除生物膜体积增长以外的关键机理,其对完整生物膜行为的刻画能力有待进一步提升。由此可见,上述建模方案分别侧重于刻画不同生物膜生长机理,但各方案因简化表征部分机理仍存在局限性。因此,亟需基于各方法之间的互补特性,构建多过程耦合的建模框架,最终实现对完整生物膜生长机理的高效描述。例如,可构建易于处理复杂边界的、基于LBM的多过程耦合模型,采用基于个体模型模拟细菌运动与附着行为,使用基于CFT的Robin边界量化EPS对附着概率的增强效应,引入多组分对流-扩散-反应方程描述营养物质扩散与摄取,并耦合Biot方程刻画剪切力作用下的生物膜变形与脱落,最终结合实验观测数据完成模型模拟的验证工作。

此外,不同尺度的生物膜生长模型均存在忽略环境条件影响的局限性。大量研究表明,pH、温度等环境条件是影响生物膜动态行为的重要因素^[62-68]。例如,pH通过影响EPS分子的电荷特性,调控矿

物表面的微生物附着行为^[62]；温度通过调节溶质运移扩散系数、微生物代谢活性，从而影响营养物质扩散与生物膜生长过程^[63-64]；pH、温度及湿度均能够影响 EPS 产量，从而改变生物膜结构^[65]。与此同时，设置合适的 pH、温度等环境条件，也是优化土壤微生物技术在污染治理和生态修复等领域应用效果的关键^[63-64, 66]。因此，在生物膜生长模型中耦合环境因子（如 pH）的动态变化至关重要。然而，由于已有机理研究不足、模型计算复杂性较高，目前仅有极少数孔隙尺度模型通过引入环境因子修正项，量化了环境条件对微生物代谢、EPS 生长等机理的调控作用，从而提升了模型对实际环境条件下生物膜动态行为的预测精度^[16, 67-68]。例如，Delavar 和 Wang^[68]通过在反应源项中引入阿伦尼乌斯（Arrhenius）型指数函数，量化了温度对底物最大比消耗速率（即单位生物量在单位时间内消耗底物的最大速率）、生物膜空间分布的影响；Delavar 和 Wang^[67]也采用指数形式的 pH 抑制项，分析了 pH 对底物最大比消耗速率的抑制效应，进而探索了 pH 对生物膜生长的综合影响。

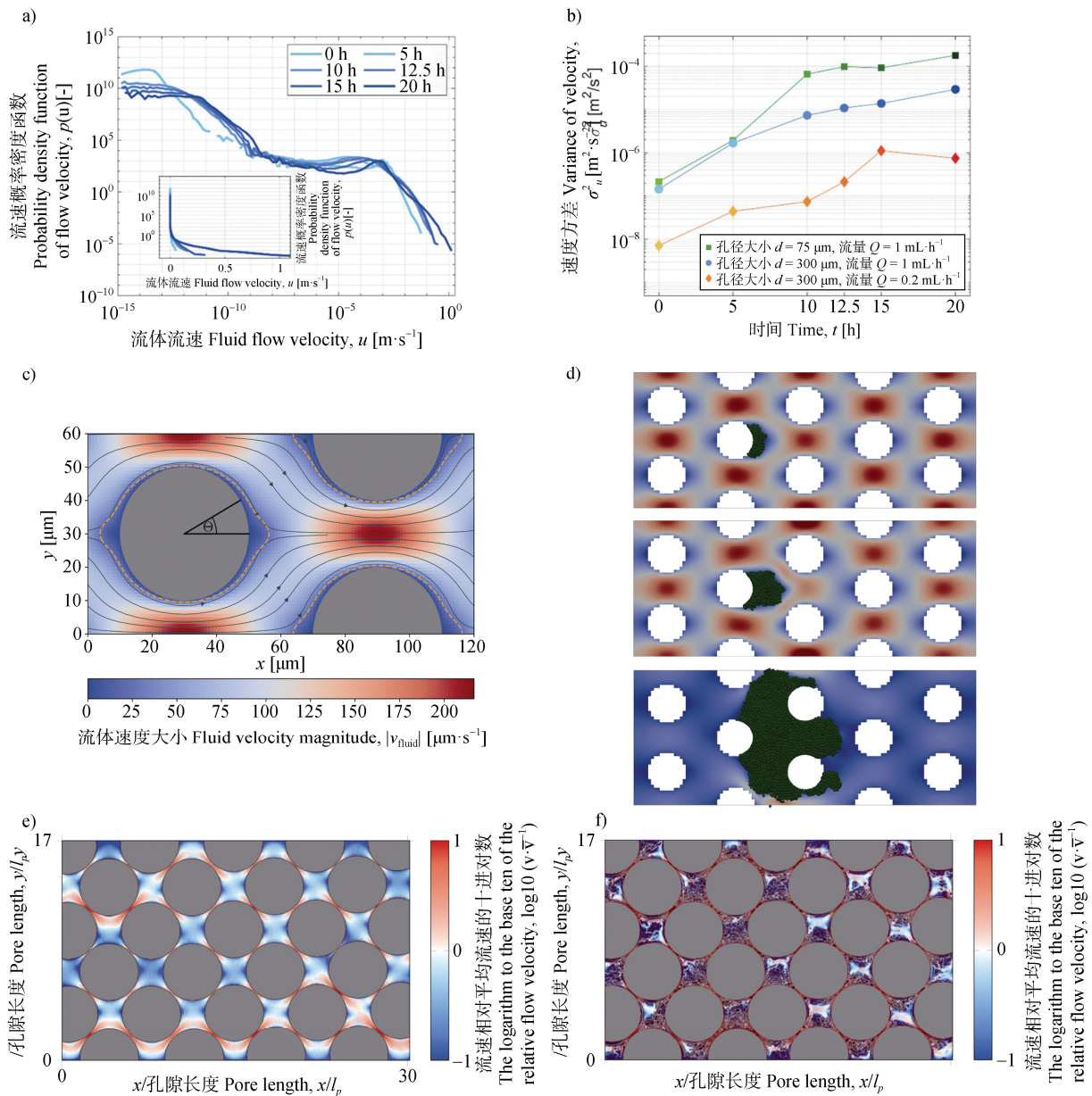
基于此，孔隙尺度生物膜生长数值模型的未来发展方向主要包括：（1）引入高分辨率成像结果，实现孔隙结构的精细表征；（2）完善生物膜生长机理的准确建模与参数化表达，结合实验数据提升模型参数的准确性，并强化多环境因子的动态耦合，进而推动孔隙尺度模型在真实多孔介质中的广泛应用。

1.2 多孔介质中生物膜生长的数值模拟

孔隙尺度生物膜生长数值模型通过高精度刻画孔隙结构的微观特征，结合流体流动、溶质运移和生物膜生长反应动力学方程，为揭示多孔介质中生物膜的动态演化机制提供了重要工具。这类模型的核心优势在于能够精确刻画微生物定植与团聚^[5, 39]、EPS 生成^[50]与脱落^[61]等微观行为，并实现孔隙尺度上物理-化学-生物复杂耦合过程的定量描述。对于孔隙尺度生物膜生长过程，这类数值模拟研究普遍关注微生物定植与团聚、EPS 生成与体积增长、生物膜稳定、剪切力作用下的生物膜脱落等关键过程。同时，这类研究多聚焦于揭示生物膜与流体之间的耦合作用，并已解析了细胞-介质表面相互作用^[61]、局部剪切力影响生物膜生长^[17, 61]、微生物行为与生物膜形态改变孔隙结构^[50, 52]等关键作用机制。

近年来，已开发的孔隙尺度模型之间存在较多差异，主要体现在孔隙结构和生物膜生长动力学机理的表征方法上。其中，仅有少量模型较为完整地模拟了生物膜生长的关键过程。例如，Kurz 等^[6, 50]通过结合微流控实验得到了真实微生物定植与团聚的结果，弥补了已有数值模拟研究忽略了生物膜生长起始阶段的不足。而这一阶段涉及细胞在多孔介质中的运移、识别与表面吸附等过程，主要受流体剪切应力和流体动力条件调控。其中，Kurz 等^[6]结合实验与数值模拟方法，探究了生物膜生长与分布对渗透率的影响。该研究的核心是基于微流控实验数据，建立了一个动态演变的生物膜渗透率场，并在此基础上使用实验图像驱动的渗透率场对模型进行了参数优化。在数值模型方面，研究基于 CFD 方法，采用 Darcy-Brinkman 方程描述了流体流动，引入 Monod 动力学方程模拟了营养物质扩散与生物膜体积演化，并通过设置剪切应力阈值描述了脱落行为。该研究探究了生物膜生长与剪切应力之间的竞争关系对优先流通道间歇性的影响，并发现生物膜生长与流体剪切应力之间的动态平衡决定了优先流通道的间歇性。同时，随着近年来三维成像技术^[56-57]以及数值模型^[69-70]的发展，微米尺度和纳米尺度的孔隙结构得以无损重建，因地球化学反应而变化的流固界面也得以高效界定。Kurz 等^[50]进一步结合微流控实验与数值模拟方法，分析了生物膜分布及其形态的水动力学响应（图 4a）。在数值模型方面，该研究通过引入 Monod 动力学方程模拟了生物膜的生长速率，并结合 Biot 方程描述了生物膜的变形。最终，模型模拟结果与 COMSOL Multiphysics 软件模拟结果高度吻合，证实了数值模型与高分辨率实验成像的结合，为孔隙尺度生物膜-流体相互作用机制的解析提供了有效工具。

针对多孔介质中微生物定植与 EPS 生成这一复杂动力学过程，现有数值模拟研究也较为有限。其中，基于 CFT 的孔隙尺度模型为介质表面初始成膜过程的精确描述提供了新思路。例如，Nelson^[58]通过修正 YHO 方程^[59]，构建了一个 Lagrangian 轨迹分析模型，为该研究量化了微生物在多孔介质表面的碰撞效率与定植概率，并引入碰撞半径等参数刻画了微生物在颗粒表面滞留与重新释放的非线性过程，进而系统研究了微生物在多孔介质中的运移与定植机制。而后，研究通过对比 RT 模型模拟结果



注：a.生物膜生长过程中不同时间步的流速概率密度函数变化曲线，改编自文献[6]；b.生物膜生长过程中不同实验条件下的流速方差变化曲线，改编自文献[6]；c.复杂多孔介质中的速度场与流线分布（灰色实线），其中角度 θ 用于描述介质表面微生物定植的位置， $|v_{\text{fluid}}|$ 为流体速度大小^[61]；d.复杂多孔介质中生物膜（绿色）初始成膜及其体积增长过程^[61]；多孔介质中无（e）、形成（f）生物膜时的速度场，其中 l_p 为孔隙长度、 $\lg(v \cdot \bar{v}^{-1})$ 为流速相对平均流速的十进对数，改编自文献[15]。Note: a.Probability density function changes of flow velocity at different time steps during biofilm growth, adapted from reference [6]; b.Variance changes of flow velocity under different experimental conditions during biofilm growth, adapted from reference [6]; c.Velocity field and streamlines distribution (gray solid lines) in a complex porous medium, where angle θ is used to describe the location of microbial colonization on the medium surface, and $|v_{\text{fluid}}|$ is fluid velocity magnitude^[61]; d.Initial biofilm formation and volume growth process in a complex porous medium (green) ^[61]; Velocity fields in porous media without (e) and with (f) biofilm formation, where l_p is pore length and $\log(v \cdot \bar{v}^{-1})$ is the logarithm to the base ten of the relative flow velocity, adapted from reference [15].

图4 孔隙尺度生物膜生长的典型算例

Fig. 4 Representative test cases of pore-scale biofilm growth models

与 Smoluchowski-Levich 扩散项解析解,证实了非布朗运动与扩散主导时模型模拟的准确性。最终,模型精确模拟了微生物在流场中的动态迁移路径,成功再现了柱实验中观察到的滞留颗粒空间分布特征,进一步证明了该模型在精细刻画微生物运移与定植行为方面的适用性。Bozorg 等^[51]同样基于 CFT 构建了一个孔隙尺度数值模型,重点分析了生物膜覆盖对微生物定植过程的动态影响。该研究使用耦合了吸附项的对流-扩散方程,精细刻画了初始成膜阶段的微生物动态行为,并通过修正碰撞概率方程,量化了介质表面生物膜对微生物定植概率的增强效应。与此同时,该研究通过对比低佩克莱数 (Péclet, Pe) 条件下的模型模拟结果与柱实验数据,证实了扩散主导时模型模拟的准确性。最终,Bozorg 等^[51]通过数值模拟再现了柱实验所观察到的微生物空间分布特征,并发现生物膜覆盖导致微生物定植概率提升 36%。在此基础上,部分学者也采用基于个体模型模拟了微生物定植与 EPS 生成这一复杂过程,进一步完成了生物膜生长关键过程的完整表征。例如, Pintelon 等^[49]使用 LBM 求解了 N-S 方程,采用 D3Q19 格式模拟了三维流动,并通过多重松弛时间 (multi-relaxation time, MRT) 算法增强了计算精度,提高了数值稳定性。在微生物生长方面,该研究使用随机游走算法模拟了微生物定植,创新性地采用基于个体模型模拟了 EPS 生成以及生物膜体积增长,引入 Monod 动力学方程刻画了微生物摄取营养物的过程,并通过定义脱落水平集 (detachment level set, DLS) 参数描述了生物膜在高剪切应力下的脱落行为。最终,研究通过对比模型模拟与实验观测的生物膜生长可视化结果,证明了该模型是精准预测不同渗透率生物膜动态生长与演化的重要工具。Lohrmann 和 Holm^[61]同样采用基于 LBM 的孔隙尺度模型描述了生物膜的生长过程,并结合基于智能体的细菌模型模拟了微观细菌行为。具体而言,该研究使用 Langevin 动力学描述了细菌的布朗运动,基于随机附着概率确定了微生物定植与否的标准,同样基于个体模型模拟了 EPS 生成与生物膜生长 (图 4b),并通过设置黏附键阈值间接模拟了生物膜脱落。最终,研究揭示了流体流动、细菌运动与生物膜形成之间的复杂相互作用,并发现流体剪切力对微生物定植位置起到了决定性的作用,而初始成膜与局部剪切力、

营养物质浓度密切相关。

此外,对于生物膜生长动力学机理,当前研究普遍关注营养物质摄取、生物膜体积增长、稳定以及脱落过程的定量描述。其中,营养物质扩散与代谢摄取直接控制了生物膜稳定后的空间分布,易受到孔隙结构与局部反应速率的耦合影响,相关研究通常采用基于 Monod 动力学的对流-扩散方程对此进行表征。而生物膜在流体作用下发生的局部脱落或剥离行为决定了生物膜的空间分布及其形态稳定,是模拟真实生物膜生长动态过程的关键机制之一,相关研究往往通过设置脱落速率^[71-72]或剪切应力阈值^[17, 73]对此进行刻画。例如, Thullner 等^[1]在早期研究中开发了二维 PNM 模型,引入 Monod 动力学刻画了微观生物膜行为,并定义“可交换距离”简单刻画了营养物的扩散与摄取。同时,该研究通过设置与脱落速率常数、平均流速、生物膜表面积相关的修正项,描述了剪切力作用下的生物膜脱落过程。在此基础上, Thullner 和 Baveye^[72]基于生物膜可变渗透率的假设,进一步开发了三维模型,以分析生物膜生长对孔隙结构和渗透率的影响。该研究采用了基于 Monod 动力学的质量守恒方程等,完善了营养物扩散与摄取、生物膜稳定过程的表征,并将脱落项中的整体平均流速定义为孔隙区域的平均流速,进而更为准确地反映了流体剪切力对生物膜脱落的作用机制。Stewart 和 Kim^[73]也为描述生物膜的生长与脱落提供了一套简单有效的参数化方案。在该研究中,生物膜生长由生物膜密度与体积分布决定,生物膜脱落则由剪切应力阈值控制,即当壁面剪切应力超过宾汉 (Bingham) 屈服应力时,孔隙中的生物膜发生整体脱落,孔隙直径恢复初始值。Qin 和 Hassanizadeh^[17]同样基于剪切应力阈值判定了脱落行为,即当剪切应力超过临界值时生物膜发生脱落。该研究还通过引入与局部剪切应力成正比的脱落速率项量化了脱落过程,同时采用体积分数演化方程、变量质量交换系数描述了生物膜生长过程。其研究表明,生物膜的生长会导致渗透率的逐步下降,并表现出明显的非线性特征。对于剪切力作用下的生物膜脱落, Aminnaji 等^[52]还使用了灭活系数间接表征了这一脱落行为,即生物膜体积随时间增长至一定阶段后因灭活系数而减少,为生物膜生长动态过程的定量描述提供了有效方法。该研究还创新性地引入 Haldane 动力学描述了

NAPL 的生物降解过程，结合体积守恒方程表征了微生物体积增长，并得出了生物膜生长会显著降低渗透率、引起孔隙结构演化、显著影响生物降解效率的结论。此外，精确表征生物膜的体积演化是生物膜生长数值模型的核心内容。为实现这一目标，相关研究采用了诸多方法，包括基于 Monod 动力学的体积演化方程、元胞自动机方法（cellular automaton method，CAM）、基于实验图像的体积获取等。例如，Jung 和 Meile^[60]假设生物膜生长受限于溶质供应，采用 Monod 动力学定义了生物膜的生长速率，并使用元胞自动机方法模拟了生物膜的生长与演化。最终，该研究通过分析不同 Pe、达姆科勒数（Damköhler，Da）条件下的模型模拟结果，并对比

了由经典 KC 方程计算出的理论结果，系统揭示了生物膜生长对孔隙率、渗透率演化的影响。Perez 等^[15]则基于实验数据，将生物膜整体等效为具有局部可变孔隙率的多孔结构，采用共聚焦显微技术提取了生物膜结构，并将其转化为局部孔隙率以描述生物膜的体积增长过程（图 4c）。最终，该研究成功解析了生物膜形态演化对流体流动的影响机理。

综上，孔隙尺度模型为研究生物膜在多孔介质中的复杂行为提供了重要工具。近年来，开发的孔隙尺度模型之间存在较多差异（表 1），主要体现在孔隙结构以及生物膜生长动力学机理的表征方法上。其中，仅有少量模型较为完整地模拟了生物膜生长的关键过程。

表 1 孔隙尺度生物膜生长建模与数值模拟研究总结

Table 1 Summary of research on pore-scale biofilm growth modeling and numerical simulation

		关键过程				
		Key processes				
作者	微生物定植与团聚	EPS 生成与体积增长	生物膜稳定	生物膜脱落过程	年份	期刊
Author	过程	过程	过程	Biofilm	Year	Journal
	Microbial colonization and aggregation process	EPS generation and volume growth process	Biofilm stabilization process	detachment process		
Thullner 等 ^[71]	—	基于 Monod 动力学的 体积变化方程	基于 Monod 动力学的对流 方程	基于脱落速率的 判别方程	2002	<i>Transport in Porous Media</i>
Stewart 和 Kim ^[73]	—	基于生物膜密度与体 积分布的孔喉直径演 化方程	基于 Monod 动力学的对流 -扩散方程	基于剪切应力阈 值的判别方程	2004	<i>Biochemical Engineering Journal</i>
Nelson ^[58]	基于 CFT 的 Lagrangian 轨迹分析方程	—	—	—	2004	<i>University of California</i>
Thullner 和 Baveye ^[72]	—	基于 Monod 动力学的 质量守恒方程	对流-扩散 方程	基于脱落速率的 判别方程	2008	<i>Biotechnology and Bioengineering</i>
Pintelon 等 ^[49]	对流-扩散方程	质量守恒方程	基于 Monod 动力学的对流 -扩散方程	基于脱落水平集 参数的判别方程	2012	<i>Biotechnology and Bioengineering</i>
Qin 和 Hassanizadeh ^[17]	—	体积分数演化方程	基于 Monod 动力学的非平 衡对流-扩散 方程	基于脱落速率的 判别方程	2015	<i>Transport in Porous Media</i>

续表

作者 Author	关键过程 Key processes				年份 Year	期刊 Journal
	微生物定植与团聚 过程 Microbial colonization and aggregation process	EPS 生成与体积增长 过程 EPS generation and volume growth process	生物膜稳定 过程 Biofilm stabilization process	生物膜脱落过程 Biofilm detachment process		
Bozorg 等 ^[51]	基于 CFT 的对流-扩散 方程	—	—	—	2015	<i>Journal of Contaminant Hydrology</i>
Aminnaji 等 ^[52]	—	基于 Haldane 动力学的 体积变化方程	基于 Haldane 动力学的对流 -扩散方程	基于灭活系数的 判别方程	2020	<i>Advances in Water Resources</i>
Jung 和 Meile ^[60]	—	基于 Monod 动力学的 对流-扩散方程	基于 Monod 动力学的对流 -扩散方程	—	2021	<i>Transport in Porous Media</i>
Perez 等 ^[15]	—	基于实验图像的经验 性方程	对流-扩散 方程	—	2022	<i>Water Research</i>
Kurz 等 ^[50]	基于实验图像的经验 性方程	基于 Monod 动力学的 质量守恒方程	基于 Monod 动力学的质量 守恒方程	基于剪切应力阈 值的判别方程	2022	<i>PNAS</i>
Kurz 等 ^[6]	基于实验图像的经验 性方程	基于实验图像的经验 性方程	—	—	2023	<i>Environmental Science & Technology</i>
Lohrmann 和 Holm ^[61]	基于 Lennard-Jones 势 的细胞相互作用方程	指数增长方程	—	基于黏附键阈值 的判别方程	2023	<i>Soft Matter</i>

所示：

2 连续介质尺度生物膜生长过程建模与数值模拟

2.1 多孔介质中生物膜生长数值模型

连续介质尺度生物膜生长数值模型基于 REV 假设，将多孔介质描述为连续介质，通过体积平均方法，表征了生物膜生长过程中流动与溶质运移的宏观特性^[36]。该方法通常采用达西定律（Darcy’s law）描述流体流动（式（6）），采用对流-扩散方程描述溶质运移过程^[24, 36]（式（7）），其数值模型概念图与求解流程图如图 5 所示，数学表达式如下

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\bar{\mathbf{u}})=0 \tag{5}$$

$$\bar{\mathbf{u}}=-\frac{\mathbf{k}}{\mu}(\nabla\bar{p}-\rho\mathbf{g}) \tag{6}$$

$$\frac{\partial(\varepsilon\bar{C})}{\partial t}+\bar{\mathbf{u}}\cdot\nabla(\bar{C})=\bar{D}\nabla^2\bar{C}+\bar{R} \tag{7}$$

式中， ε 为孔隙率， $\bar{\mathbf{u}}$ （ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ）、 $\bar{p}$ （ Pa ）、 $\bar{C}$ （ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ）分别为达西速度、压力、浓度， $\mathbf{k}$ （ m^2 ）为多孔介质渗透率， μ （ $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ）为动力黏度， $\mathbf{g}$ （ $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ ）

为重力加速度, $\bar{D}$ ($m^2 \cdot s^{-1}$) 为有效弥散系数^[24, 74-75]。具体而言, 式 (5) 中从左至右依次为瞬态项 ($\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t}$)、散度项 ($\nabla \cdot \bar{u}$)^[24, 75]。式 (6) 中, $\frac{k}{\mu}$ 是流体流动性系数, 负号表示流动方向与压力梯度方向相反; ∇p 为压力梯度, ρg 为重力体积力, 二者

共同驱动流体流动^[24, 75]。此外, 在式 (7) 中, 从左至右依次为瞬态项 ($\frac{\partial(\varepsilon\bar{C})}{\partial t}$)、对流项 ($\bar{u} \cdot \nabla(\bar{C})$)、弥散项 ($\bar{D}\nabla^2\bar{C}$) 和基于 Monod 动力学等的反应源项 ($\bar{R}$)。其中, $\bar{R}$ 表征的是生物膜生长、基质生成和溶质消耗等过程^[24, 75]。

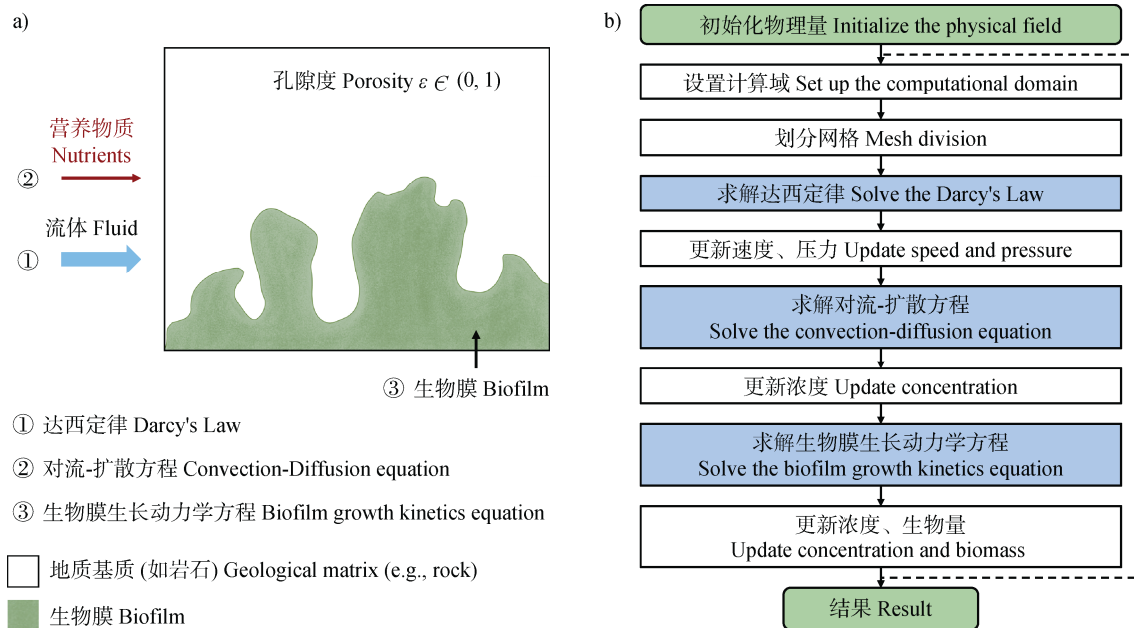


图 5 连续介质尺度生物膜生长数值模型概念图 (a) 与求解流程图 (b)

Fig. 5 Conceptual diagram of continuum-scale biofilm growth numerical model (a) and solving flowchart (b)

相比于孔隙尺度模型对微生物附着、EPS 生长与脱落等微观机理的细致描述, 连续介质尺度模型更侧重于宏观描述生物膜的结构演化、生长边界动态扩展等过程。这类模型的优势包括: (1) 能够捕捉生物膜的整体演化规律^[36]。例如, Eberl 等^[33]采用连续介质尺度模型, 定量分析了生物膜表面粗糙度对传质效率的影响, 证明了模型能够有效描述复杂耦合过程中的溶质运移行为; Arjes 等^[32]通过三维连续介质尺度模型揭示了生物膜内基质与营养共享的互惠机制。(2) 由于其与实验研究尺度较为匹配, 连续介质尺度模型已成为动态耦合环境因子的首选工具。具体而言, 这类研究通过引入环境因子修正项、优化反应源项 (R), 构建了环境因子与生物膜生长动力学关键参数之间的定量关系, 进而更为精确地刻画了实际多孔介质中生物膜-环境条件的复杂互馈过程^[76-79]。例如, Monroy 等^[79]采用指数修正项分别量化了 pH 和温度对实际比生长速率 (微生

物的实际增长速率) 的抑制效应, Elsayed 等^[76]则使用 Arrhenius 公式对动力学关键参数 (如最大比生长速率) 进行了温度修正, 并进一步分析了温度对生物膜厚度等特征的调控作用。然而, 这类模型也存在一定的局限性。首先, 模型在参数化过程中通常基于体积平均假设, 即假设孔隙结构均质, 忽略了微观尺度异质性, 如孔隙结构演化、局部流速及化学环境变化等^[32-33]。其次, 现有多数模型仍假设生物膜生长动力学关键参数恒定, 显式耦合环境因子的动态变化仍是这类模型的重要发展方向。此外, 模型对异质性孔隙结构的简化, 使其难以刻画孔隙尺度生物膜-流体界面的局部相互作用^[33-34]。同时, 模型对完整生物膜行为的简化处理, 也使其难以准确描述生物膜动态生长过程。例如, 现有模型往往简化甚至忽略了生物膜的黏弹性力学特性, 这限制了模型对生物膜脱落机制的描述能力^[25]。

针对上述局限性, 已有研究尝试从多个方向改

进连续介质尺度模型：(1) 引入更具物理约束性的生物膜反应-扩散机制, 实现更精确的生物膜生长过程表征。例如, Eberl 等^[74]引入密度依赖性扩散系数描述了微生物的非线性扩散行为, 并利用模拟结果对比实验观测, 证实了模拟结果能成功再现实验观测到的生物膜簇-通道结构, 为提高连续介质尺度生物膜形态的预测能力提供了科学依据。Balsa-Canto 等^[25]同样引入了这一非线性扩散机制, 并基于 Logistic 增长函数描述了生物膜内微生物的整体增长行 d 为, 准确模拟了营养物浓度控制下的生物膜边界扩展过程。然而, 这些模型均设置了静水条件, 忽略了流体剪切力对生物膜行为的影响。(2) 引入力学本构关系, 拓展模型对生物膜行为的表征能力。例如, Towler 等^[34]针对生物膜在流体作用下的力学响应问题, 构建了基于 Burger 黏弹性本构方程的连续介质尺度模型。研究通过有限元方法模拟了剪切力诱导下的生物膜形变过程, 揭示了局部应力集中区的形成机制, 为理解生物膜脱落行为提供了理论依据。但该研究并未考虑生物膜结构的异质性与力学参数随时间的动态演化, 限制了其对长期脱落行为的精准预测。此外, 研究表明, 连续介质尺度模型还将通过强化物理-化学-生物耦合机制 (如拓展三维模拟研究^[25]), 不断提升其对复杂系统中生物膜行为的综合表征能力。

基于此, 连续介质尺度生物膜生长数值模型的未来发展方向主要包括：(1) 结合实验数据, 提升模型参数的准确性与真实性；(2) 增强模型对生物膜生长、形变、脱落等过程的描述能力；(3) 优化多环境因子的动态耦合参数化方案, 为生物膜生长建模提供更为高效的数值框架, 为模型在生物修复等领域的实际应用提供科学依据。

2.2 多孔介质中生物膜生长的数值模拟

连续介质尺度模型能够有效捕捉生物膜生长的动态行为, 描述流动与反应溶质迁移等过程, 广泛应用于较大尺度多孔介质中生物膜生长的数值模拟。相比于孔隙尺度模型, 其优势在于简化复杂的微观相互作用, 并对生物膜行为提供整体性描述。已有的连续介质尺度数值模拟研究主要基于连续介质理论, 将复杂微观过程通过参数化手段封装为宏观参数, 描述了生物膜结构演化、生长边界动态扩展等过程。经总结可得, 这类研究多聚焦于揭示生物膜在多孔介质中的宏观生长动力学特征与传质行

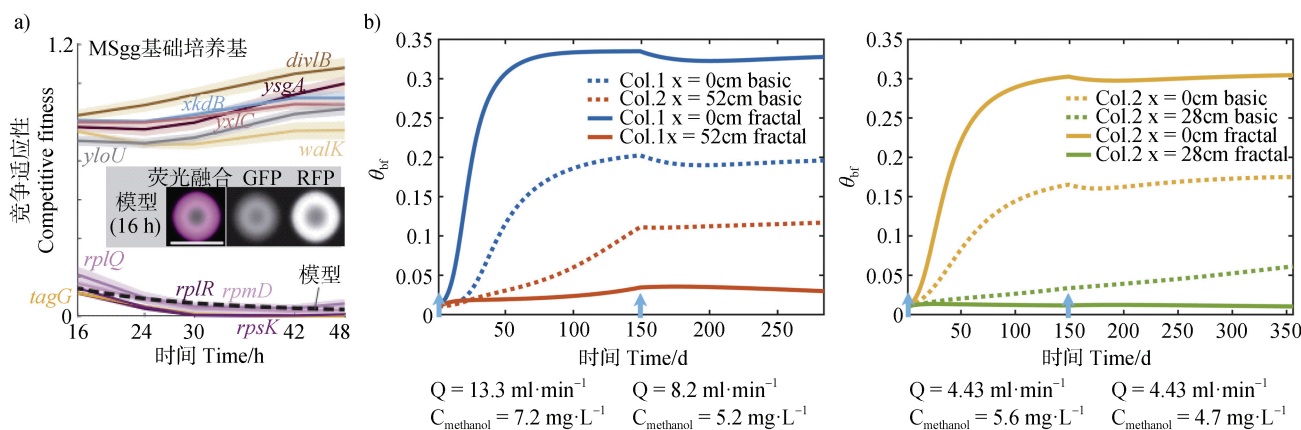
为, 并已阐明了营养浓度分布、流体剪切力、黏弹性变形等因素对生物膜行为的关键作用机制。

近年来, 已开发的连续介质尺度模型较少。通过对比可以发现, 这些模型主要在参数化方案上存在显著差异。其中, 部分研究通过引入密度依赖性扩散系数, 实现了对生物膜的非线性扩散行为建模。例如, Eberl 等^[74]提出了这一系数, 并将其设置为当密度接近最大值时生物量扩散显著, 而当密度较小时生物量扩散几乎停止。基于此, 研究使用非线性反应-扩散方程刻画了生物膜的边界扩展, 采用 Monod 动力学方程描述了生物膜与底物浓度之间的作用, 并基于时空连续模型从三维视角模拟了生物膜的动态生长过程。经对比验证, 该研究成功再现了实验观测到的生物膜簇-通道结构, 揭示了生物膜在营养驱动下的空间扩展机制, 但该研究仅考虑了营养物扩散与生物膜反应过程。Balsa-Canto 等^[25]也在数值模型中使用了非线性扩散系数与反应项相结合的参数化方案, 通过引入退化扩散项和奇异扩散项调控了静水环境下的生物膜边界, 并进一步利用微生物批次培养实验数据, 结合 Logistic 增长函数优化了反应源项。该研究描述了生物膜在批量培养条件下的营养消耗与积累行为, 并通过对比数值模拟结果与多个已发表算例的模拟结果, 证明了模型在预测生物膜生长方面的有效性, 进而阐明了生物膜在非线反应-扩散条件下的边界演化特征。

现有多数研究则使用传统扩散-反应框架, 描述生物膜生长对营养物质的消耗与转化, 并进一步实现了生物膜生长过程的数值模拟。例如, Eberl 等^[33]采用了基于 Monod 动力学的反应源项对生物膜内的营养消耗与微生物生长过程进行了参数化, 同时采用 CDE 对生物膜相和流体相中的溶质运移行为进行了统一描述。对于流体与生物膜界面处的传质过程, Eberl 等^[33]将传质速率参数化为舍伍德数 (Sherwood, Sh) 与雷诺数 (Reynolds, Re) 之间的经验关系, 模拟了实际边界中的营养物质传递。同时, 该研究发现模型模拟与实验观测的流速分布特征高度一致, 实现了三维生物膜结构中复杂耦合过程的高精度模拟, 进而揭示了流速等水动力条件对传质效率与局部反应速率分布的调控机制。Arjes 等^[32]使用了类似的参数化方法, 通过结合实验数据与营养依赖的菌落生长模型, 简化了菌落内营养梯度与细胞增长之间的复杂耦合机制, 量化了生长速率

对局部营养浓度的响应关系。该研究通过调控生长函数中的营养参数,模拟了不同突变体在共培养条件下的生长过程,进而明确了不同基因型生物膜内部的基质、营养互惠机制,阐明了多菌株生物膜中互惠共生的宏观行为特征(图 6a)。Wang 等^[80]则构建了一个基于多速率质量传输(multi-rate mass transfer, MRMT)理论的连续介质尺度模型,采用 Monod 动力学方程描述了生物膜对底

物的摄取过程,使用 Logistic 增长函数表征了生物膜的空间扩展过程,并引入分形记忆函数刻画了生物膜与流体之间的质量交换行为。而后,该研究发现模型模拟与实验观测所得的穿透曲线高度吻合,证实了模型模拟的准确性。最终,Wang 等^[80]成功模拟了生物膜体积增长(图 6b)及其引起的非菲克扩散,并揭示了生物膜形态演变对质量输运行为的影响机制。



注: a.生物膜生长过程中最高、最低菌株竞争适合度随时间的变化曲线,改编自文献[32]; b.基于均匀增长模型(basic)、分形增长模型(fractal)的生物膜体积分数(θ_{br})变化曲线,其中 Q 为流量、 $C_{methanol}$ 为进水甲醇浓度^[80]。Note: a.A curve showing the changes in the maximum and minimum strain competitive fitness during biofilm growth, adapted from reference [32]; b.Biofilm volume fraction (θ_{br}) change curves based on the basic model and fractal growth model, where Q is the flow rate, and $C_{methanol}$ is the concentration of methanol in the influent^[80].

图 6 连续介质尺度生物膜生长典型算例

Fig. 6 Representative test cases of continuum-scale biofilm growth models

此外,已有研究还通过引入复杂的本构关系,模拟了生物膜结构的动态形变。例如,Towler 等^[34]将生物膜视为黏弹性材料,引入 Burger 方程表征了生物膜在流体剪切力作用下的力学响应,并量化了材料系数对生物膜形变的影响。而后,该研究成功基于数值模型复现了实验观测到的生物膜复杂应变响应,解析了流体剪切力作用下生物膜的黏弹性形变,并进一步揭示了生物膜脱落发生的临界条件。最终,该研究指出了弹性模量参数数值降低导致拖曳力增加、升力减小的力学机制,并发现当平均流速增加 20% (由 1.0 增加至 $1.2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$) 时,仅对于低弹性模量生物膜所受的流体合力(拖曳力、升力的矢量和),30 s 与初始时刻的合力比值将由 1.51 升至 1.69。该研究还指出,生物膜在初始松弛阶段,内部应力最为集中,且当其超过材料失效力时,最易发生整体或部分的生物膜脱落。

综上,相比于孔隙尺度模型、多尺度模型,近年来基于连续介质尺度模型开展的数值模拟研究较少。经对比分析可以发现,最新开发的连续介质尺度模型之间存在较多差异(表 2),主要体现为参数化方案的不同。

3 多尺度生物膜生长过程建模与数值模拟

3.1 多孔介质生物膜生长数值模型

多孔介质的高度异质性使得生物膜的生长过程具有多尺度特征^[24],这导致单一尺度的数值模型难以全面描述生物膜的动力学行为。因此,近年来多尺度建模方法受到广泛关注。多尺度生物膜生长数值模型的核心内容是构建能够有效整合微观异质性

表 2 连续介质尺度生物膜生长数值模型的参数化方案总结

Table 2 Summary of parameterization schemes for numerical models of biofilm growth at the continuum scale

作者	扩散系数	生物膜生长速率	其他	年份	期刊
Author	Diffusion coefficient	Biofilm growth rate	Other	Year	Journal
Eberl 等 ^[33]	固定值	基于 Monod 动力学的生长速率	—	2000	<i>Chemical Engineering Science</i>
Eberl 等 ^[74]	非线性密度依赖扩散系数	基于 Monod 动力学的生长速率	—	2001	<i>Journal of Theoretical Medicine</i>
Towler 等 ^[34]	—	—	Burger 黏弹性本构方程	2007	<i>Biotechnology and Bioengineering</i>
Balsa-Canto 等 ^[25]	非线性密度依赖扩散系数	基于 Logistic 增长函数的生长速率	—	2017	<i>Applied Mathematical Modelling</i>
Arjes 等 ^[32]	固定值	基于 Monod 动力学的生长速率	基于实验结果的经验性方程	2021	<i>eLife</i>
Wang 等 ^[80]	基于分形记忆函数的扩散系数	基于 Monod 动力学、Logistic 增长函数的生长速率	—	2024	<i>Water Resources Research</i>

与宏观输运过程之间相互作用的数学框架，并在此基础上提高模型模拟精度与适用性^[36-37]。其理论框架通常包括 DBS 微观连续理论框架和域分解方法（DDM）^[14, 24]。在 DBS 框架下，多尺度模型通过体积平均理论统一描述自由流动区与多孔介质区的流体流动，并通过局部网格分辨率和体积平均实现微观-宏观耦合^[81-82]（图 7a）。其核心方程为：

$$\frac{1}{\varepsilon_f} \left(\frac{\partial \rho \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\varepsilon_f} \bar{\mathbf{u}}_f \bar{\mathbf{u}}_f \right) \right) = -\nabla \bar{p}_f + \rho \mathbf{g} + \frac{\mu}{\varepsilon_f} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}}_f - \frac{\mu}{\mathbf{k}_f} \bar{\mathbf{u}}_f \quad (8)$$

式中， ε_f 为孔隙体积分数且其取值范围是 0 到 1， $\bar{\mathbf{u}}_f$ （ $m \cdot s^{-1}$ ）为体积平均速度， $\bar{p}_f$ （ Pa ）为体积平均压力， $\mathbf{k}_f$ （ m^2 ）为渗透率，且渗透率通常基于孔隙率 ε 、使用 Kozeny-Carman（KC）方程计算^[24, 75]。其中，包括孔隙率在内的多孔介质特征将随地球化学过程的发生而迭代更新。具体而言，公式左侧两项共同表征惯性效应，公式右侧从左至右依次为压

力梯度项（ $-\nabla \bar{p}_f$ ）、重力项（ $\rho \mathbf{g}$ ）、Brinkman 黏性项（ $\frac{\mu}{\varepsilon_f} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}}_f$ ）和达西阻力项（ $-\frac{\mu}{\mathbf{k}_f} \bar{\mathbf{u}}_f$ ）^[24, 75]。因此，当 ε_f 接近 1 时，表示单元中没有固体相，流体流动由 N-S 方程控制；当 $0 < \varepsilon_f < 1$ 时，Brinkman 项（ $\frac{\mu}{\varepsilon_f} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}}_f$ ）和达西项（ $-\frac{\mu}{\mathbf{k}_f} \bar{\mathbf{u}}_f$ ）共同表征多孔介质中的流动阻力^[75]。在此基础上，基于体积平均的对流-扩散方程可描述为^[83]：

$$\frac{\partial (\varepsilon_f \bar{C}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}_f \bar{C}_f) = \nabla \cdot (\varepsilon_f \mathbf{D} \nabla \bar{C}_f) + R_f \quad (9)$$

式中， $\bar{C}_f kg \cdot m^{-3}$ 为平均浓度， $\varepsilon_f \mathbf{D}$ 为分子扩散率， R_f 为反应源项^[83]。具体而言，公式从左至右依次为瞬态项（ $\frac{\partial (\varepsilon_f \bar{C}_f)}{\partial t}$ ）、对流项（ $\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}_f \bar{C}_f)$ ）、扩散项（ $\nabla \cdot (\varepsilon_f \mathbf{D} \nabla \bar{C}_f)$ ）和源项（ R_f ）。其中， R_f 表征的是底物消耗与生物膜生长等关键过程，是耦合微观生物膜动力学过程与宏观输运过程的关键。例如，Carrillo 和 Bourg^[83] 基于 DBS 框架开发了

Darcy-Brinkman-Biot (DBB) 模型, 并成功模拟了多相流动与固体变形的复杂现象。该模型通过对自由流体区 ($\varepsilon_f=1$) 与多孔介质区 ($\varepsilon_f<1$) 进行统一求解, 避免了传统方法中复杂的界面条件设定。其控制方程在自由流动区域采用 N-S 方程, 在多孔介质区域采用 Biot 理论, 进而统一描述了多相流体流动与多孔介质变形行为, 准确捕捉了流-固耦合作用下的界面动力学。

与此同时, 相比于 DBS 框架, DDM 是国内外

学者构建多尺度生物膜生长数值模型时的常用方法。该方法将计算域显式划分为多个子域, 在不同子域内采用适合的模型, 并通过设置界面条件进行子域耦合, 以实现微观信息与宏观描述的有效结合^[35, 84-85]。DDM 的基本原理是在整个计算域内定义微观尺度和宏观尺度的区域, 在微观尺度区域采用 N-S 方程描述流体流动, 而宏观尺度区域遵循达西定律, 二者通过迭代修正方程实现界面处速度与压力边界条件的连续性^[24, 86] (图 7)。

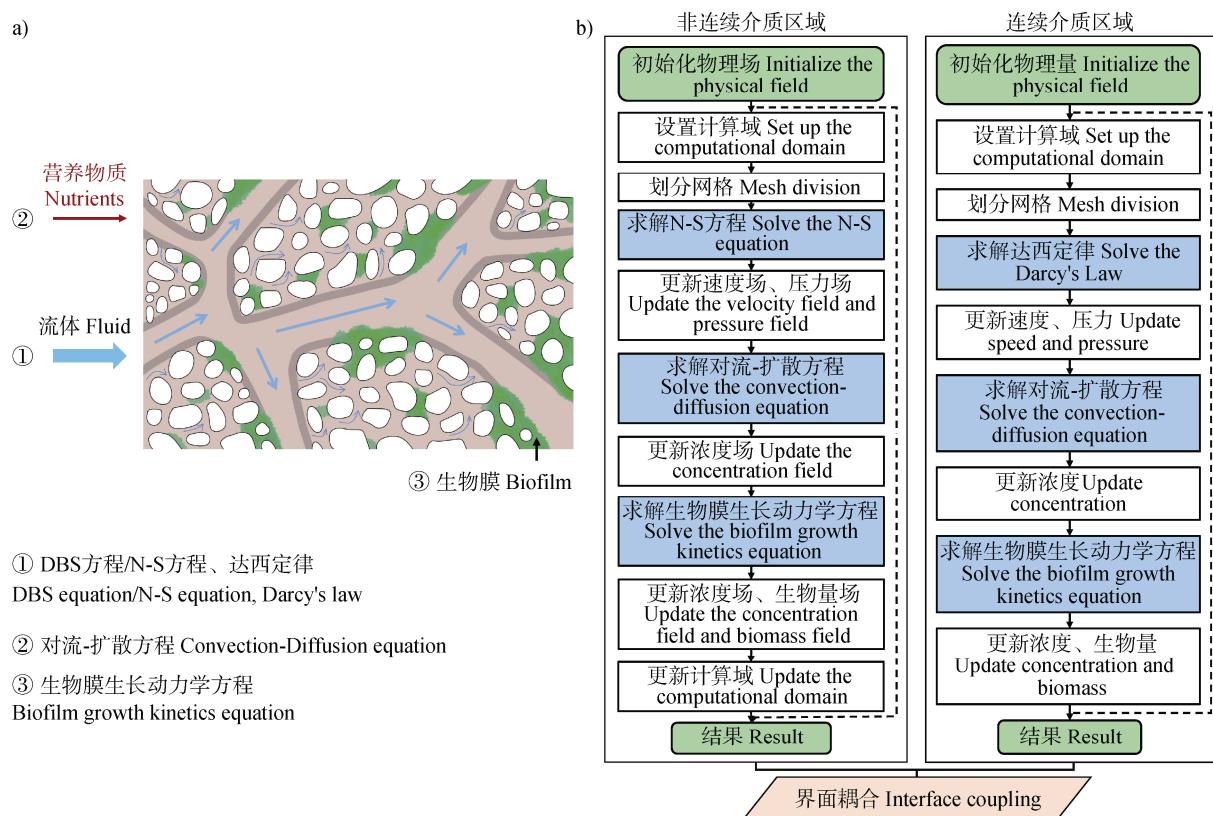


图 7 多尺度生物膜生长数值模型概念图 (a) 与基于 DDM 构建模型的求解流程图 (b)

Fig. 7 Conceptual diagram of multi-scale biofilm growth numerical model (a) and solving flowchart of Model Construction Based on DDM (b)

型面临的关键挑战是建立微观-宏观耦合模型框架和参数升尺度, 进而保证微观-宏观信息传递的稳定性与准确性。此外, 多尺度模型同样缺乏对环境因子的动态耦合, 使其难以准确捕捉真实环境中生物膜的跨尺度动态行为。具体而言, 目前仅有极少数模型通过结合实验观测数据或优化反应源项, 定量描述了不同环境条件下的生物膜生长过程, 从而提升了模型对复杂环境条件下生物膜动态行为的预测精度。例如, Wang 等^[87]通过实验测定了不同温度下微生物的最大比生长速率等参数, 并基于此

分析了温度对生物膜生长速率的增强效应; Sangha 等^[88]通过在源项中引入 Rosso 经验方程, 对实验测定的最大比生长速率进行了基于 pH 的修正, 从而分析了 pH 在驱动生物膜结构演变过程中的关键影响。

针对以上研究挑战, 已有研究提出了对应的解决方案: (1) 构建物理意义一致的边界耦合策略, 减少多尺度模型界面处的不连续性误差。例如, Yousefzadeh 和 Battiatto^[85]为降低多尺度模型在界面处的耦合误差, 提出了一种非侵入式混合建模方法。

该研究通过定义边界条件保证了模型预测的可靠性,实现了连续介质尺度与孔隙尺度之间状态量与通量的稳定耦合。最终,模型验证结果表明界面处的耦合误差可稳定控制于上限内,为不同子域之间准确的信息传递提供了适用性较高的建模方案。(2)引入高精度成像结果,提升对多孔介质空间异质性的表征能力。例如,Yan 等^[14]针对生物膜空间分布对宏观反应速率的调控作用,采用 XCT 技术获取了真实孔隙结构,并在此基础上使用域分解方法构建了多尺度模型,其模拟结果成功复现了异质性生物膜降低总体反应速率的实验现象,进一步证实了模型在模拟空间异质性分布及其宏观响应方面的准确性。但该研究未考虑生物膜生长过程中的底物竞争与消耗行为,模型对反应速率及代谢调控过程的描述仍有待完善。(3)结合实验数据优化模型参数,提升多尺度模型的模拟精度。例如,Pearce 等^[89]结合实验观测与多尺度数值模拟,围绕剪切诱导的膜内细胞非对称性形成机制展开研究。研究通过实时观测细胞取向、排列及结构变化,获取关键参数并嵌入模型进行计算,优化了细胞取向张力与生长驱动力等参数设定。最终,模型模拟结果成功再现了流场诱导的结构不对称演化过程,验证了实验数据驱动参数构建在提升模型可信度与预测能力方面的有效性。但模型构建依赖于特定实验条件,难以直接扩展至多种复杂环境。

基于此,多尺度模型的未来改进工作应聚焦于以下四个方面:(1)优化微观-宏观耦合策略,提升跨尺度信息传递的连续性与准确性;(2)引入高分辨率成像结果,构建基于真实孔隙结构的高精度建模框架;(3)结合实验观测数据,提升模型参数准确性与模型泛化能力;(4)强化多环境因子的动态耦合,提升模型对实际环境条件下生物膜生长的模拟精度,从而推动多尺度模型在真实多孔介质中的精准模拟与广泛应用。

3.2 多孔介质中生物膜生长的数值模拟

相较于单一尺度模型,多尺度模型能更精准、高效地对生物膜的动态行为、反应和迁移等过程进行定量描述,并在生物膜生长的数值模拟研究中展现出显著优势。这类研究普遍关注微观动力学过程对宏观行为特征的调控作用,而微观-宏观耦合机制是实现跨尺度信息传递及机理解析的关键。

对于 DBS 框架,Carrillo 和 Bourg^[83]采用这一

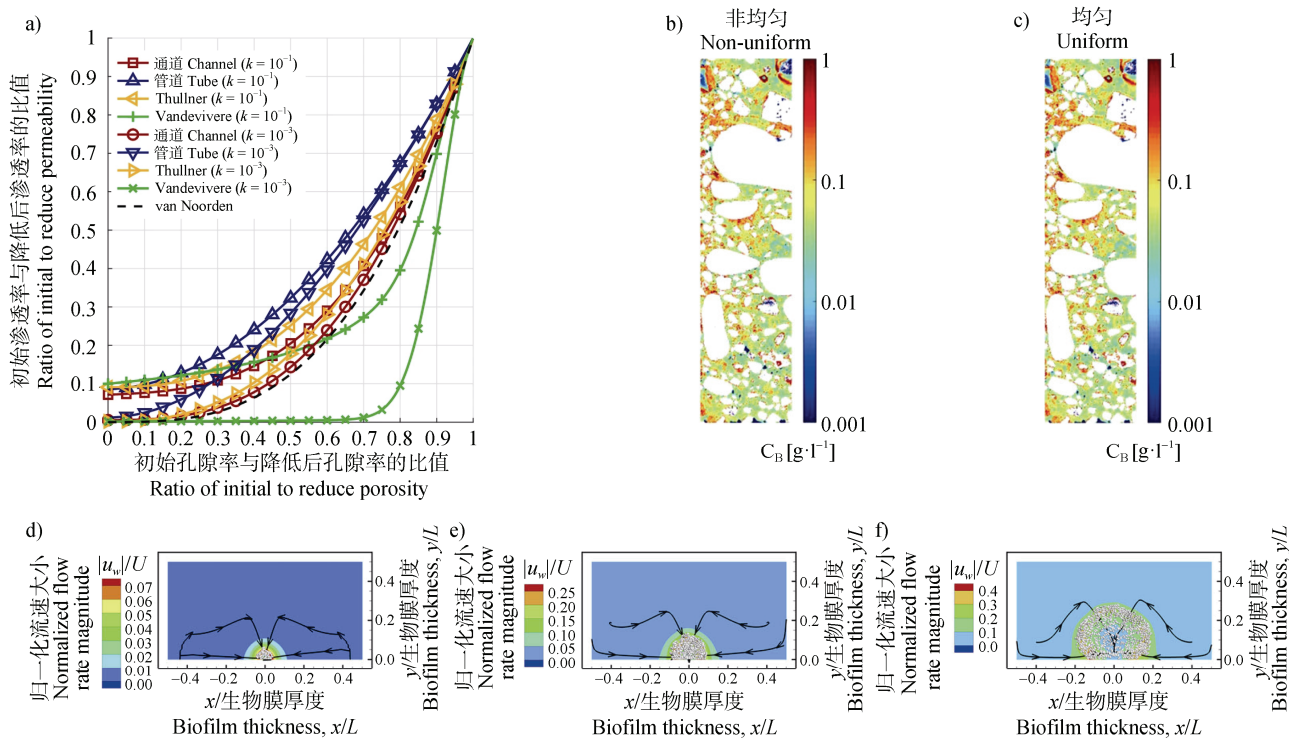
方法开发了开源求解器 hybridBiotInterFoam,并成功模拟了多相流动与固体变形的复杂现象。该研究通过引入体积平均法,将流体和固体的动量守恒方程纳入统一框架。其中,流体方程考虑了多相流的毛细效应和相对渗透率,固体方程则引入了 Terzaghi 有效应力原理。而后,压裂实验图像、解析解和模型预测结果的对比情况表明,该框架能够准确描述固体变形与流体流动之间的耦合关系。最终,该研究发现,当流体黏度从 5 cp 增至 176 cp 时,流体入侵模式从均匀渗流转变为非均匀压裂,并伴随明显的裂缝扩展。与此同时,Li 和 Yang^[16]、Dawi 等^[90]也采用这一框架精确分析了微观生物膜的动态行为,进一步证实了 DBS 方法具有准确捕捉生物膜力学响应与流固界面演化的能力。

与此同时,其他研究主要采用 DDM 构建多尺度模型。经总结发现,近年来已开发的模型之间存在部分差异,并主要体现在微观-宏观耦合方式与方法层面。已有基于 DDM 的多尺度模型主要采用了以下 3 种耦合方式:离散-连续耦合、升尺度以及双域耦合(表 3)。这些方法在微观尺度与宏观尺度之间的信息传递与机理表征中具有重要作用,为揭示生物膜生长过程中的多尺度动态行为提供了理论支持与技术手段。其中,升尺度方法通过体积平均、渐近展开等方法,将孔隙尺度过程映射为宏观尺度有效参数,并在此基础上通过构建连续介质尺度的等效控制方程,实现了参数的尺度转换与微观机制的表达。Bahar 等^[13]、Landa-Marbán 等^[91]均采用这一经典耦合方法构建了多尺度模型。其中,Bahar 等^[13]基于体积平均法构建了包含生物膜-流体-NAPL 三相的质量守恒方程,引入闭合变量描述了浓度偏差场与平均浓度梯度的关系,并利用有限元法对闭合变量进行数值求解,从而获得了有效扩散张量与传质系数。通过对比数值模拟结果,该研究验证了局部质量平衡假设在低 Pe (即 $Pe < 1$) 与低 Da (即 $Da < 1$) 条件下的有效性,确保了模型的准确性和可靠性。此外,为描述抑制性底物的降解过程,该研究还引入了 Haldane 动力学方程。通过结合 Haldane 动力学和有限元法求解了闭合问题,Bahar 等^[13]成功预测了生物膜对 NAPL 溶解的生物增强效应,证实了模型在多相流和生物降解反应中的高效性,为定量描述复杂多相系统中的反应迁移提供了高效工具。Landa-Marbán 等^[91]则针对管道等复杂几

何环境中的多组分生物膜生长行为,基于 Brinkman-Stokes 方程与多组分质量守恒方程,结合渐近展开法构建了多尺度模型。其模拟结果展示了生物膜组成、孔隙率、渗透率的协同演化过程(图 8a),刻画了 EPS、水、细菌比例对宏观运输能力的动态调节作用,为生物膜生长数值模型的简化建模提供了理论支持。最终,该研究发现,当生物膜渗透性(k)从 $1 \times 10^{-1} m^2$ (高渗透性)降至 $1 \times 10^{-3} m^2$ (低渗透性)时,孔隙率-渗透率关系曲线的斜率变化更为显著(图 8a)。即对于高渗透性生物膜,在孔隙率减小时,多孔介质渗透率下降得更为缓慢。

双域耦合框架也是多尺度数值模拟中重要的耦合方法。该方法通过在孔隙尺度与连续介质尺度之间构建嵌套求解区域,利用边界条件传递通量与状态量^[24],实现了微观-宏观尺度的信息双向传递。

Tang 等^[92]、Yousefzadeh 和 Battisto^[85]均采用了这一框架。其中,Tang 等^[92]提出了一种基于 Mortar 方法的混合模型,解析了生物膜引起的孔隙率变化与扩散限制效应。该研究创新性地引入了动态调整策略,将孔隙尺度子域的范围与 Da 数阈值相关联,使得模型仅在反应主导区采用孔隙尺度方程进行求解,而其余区域采用连续介质尺度方程进行求解。通过对比孔隙尺度模型、连续介质尺度模型以及混合模型的模拟结果,该研究验证了混合模型在 Da 数值范围较大情况下($Da = 0.1 \sim 12,000$)的准确性,尤其在生物膜生长显著改变孔隙结构时($Da > 1$)。其模拟结果展示了异质孔隙结构中局部反应热点的形成与演化过程,描述了高反应区的局部反应迁移与微观生物膜生长过程,并成功揭示了反应主导区的反应迁移行为与生物膜空间分布之间的耦合关



注: a.不同生物膜渗透率条件下的孔隙率-渗透率变化曲线,改编自文献[91];非均匀(b)、均匀(c)初始生物量分布条件下的生物膜空间分布,其中 C_B 是控制体积内孔隙空间生物量的平均浓度^[14];生物膜生长过程中,12 h (d)、18 h (e) 和 24 h (f) 时的流速、流线 ($z=0$) 分布情况,其中 u_w 是水流速度向量、 L 是生物膜厚度,改编自文献[37]。Note: a.Porosity-permeability variation curves under different biofilm permeability conditions, adapted from reference [91]; Biofilm spatial distribution under non-uniform (b) and uniform (c) initial biomass distribution conditions, where C_B is the averaged concentration of biomass over pore spaces in the control volume^[14]; Flow rate and streamline ($z=0$) distribution during biofilm growth at 12 h (d), 18 h (e), and 24 h (f), where u_w is water velocity vectors and L is biofilm thickness, adapted from reference [37].

图 8 多尺度模型生物膜生长的典型模拟算例

Fig. 8 Representative test cases of multi-scale biofilm growth models

系。Yan 等^[14]同样针对多孔介质中生物膜异质性和宏观反应速率的调控机制展开研究,并基于 XCT 数据构建了多尺度模型。其模拟结果强调了生物膜沿优先流通道表面生长的空间分布特征,准确复现了异质性生物膜降低总体反应速率的实验现象,并阐明了异质性生物膜通过抑制电子供体/受体接触效率降低反应速率的机理。同时,通过对比连续模型模拟的硝酸盐降解速率,该研究证实了多尺度模型能够精确模拟生物膜的空间分布(图 8b)。Yousefzadeh 和 Battisto^[85]针对反应-扩散系统中多尺度边界耦合精度不足的问题,提出了一种非侵入式混合模型。研究采用有限体积法对界面通量进行离散化,通过定义边界条件保证了模型预测的可靠性,进一步实现了连续介质尺度与孔隙尺度之间状态量与通量的稳定耦合。数值实验验证了该方法在高 Pe 数和高 Da 数下耦合误差受控的特性。基于此,该研究准确描述了圆柱阵列中的复杂耦合过程,揭示了高反应速率区微观浓度梯度对宏观通量的主导作用,阐明了界面通量的传递机制,为多尺度反应迁移的预测提供了有效工具。

近年来,离散-连续耦合策略成为相关研究常用的耦合方法之一。该方法通过在子域之间建立动态耦合条件,使得界面处的应力平衡,通量一致,确保了模型在物理意义上的正确性和计算的准确性。例如, Ray 等^[93]针对生物膜生长对反应迁移行为的调控,构建了结合 CAM 和局部不连续 Galerkin 方法的多尺度模型,分别描述了孔隙结构的动态演化、连续域中的反应迁移行为。研究首先在孔隙尺度上显式模拟了细菌生长、黏附剂聚集与颗粒重排,而后基于标准均质化理论获取了有效孔隙率等宏观参数。其模拟结果展示了结构演化对渗透性的阶段性调控,刻画了生物膜自组织演化等过程,为孔隙结构演变驱动的反应迁移建模提供了新方案。与此同时,随着计算能力的提升与实验技术的进步,近年来生物膜行为与细菌之间相互作用的解析已成为多尺度数值模拟领域的研究热点。Pearce 等^[89]基于 DEDALUS 开源求解器结合连续模型和基于个体的细胞模型,围绕剪切诱导的膜内细胞非对称性形成机制展开研究。其中,连续模型描述了流体流动与生物膜运动,并采用有限体积法求解了 N-S 方程;离散模型表征了细菌细胞行为,并结合水平集方法追踪了生物膜界面的演化。该研究模拟了细胞在不

同发育阶段的取向演化过程,揭示了生物膜生长-细胞取向-流体剪切三者之间的反馈机制,并通过对比实验观测证实了该模型在模拟三维生物膜生长与演化方面的准确性。Jin 和 Marshall^[37]则针对细菌间相互作用对生物膜空间结构的影响,结合离散元模型构建了混合模型。其中,细菌细胞的运动和相互作用通过离散元方法进行求解,包括细胞之间的润滑力、黏附力、拖曳力和菌毛力。EPS 和流体则作为连续介质,其动量方程和质量守恒方程通过有限体积法进行求解。最终,该研究精确描述了三维生物膜的动态生长过程(图 8c),刻画了细胞排列、聚集与层次结构的形成过程,并成功捕捉了细菌细胞的个体行为,为生物膜形成机制与细胞动态行为研究提供了理论支持。

综上,基于 DDM 构建的最新多尺度模型之间存在较多差异(表 3),主要体现在微观-宏观耦合方式(离散-连续耦合、升尺度、双域耦合)及方法的不同。同时,多尺度模型的广泛应用及其相关模拟结果,证明了生物膜动态行为表征能力的逐步提升,推动了各领域对生物膜生长机制的深入理解,为土壤微生物技术在污染治理、生物修复等工程中的实际应用提供了理论支撑。

4 结论与展望

本综述基于孔隙尺度、连续介质尺度与多尺度模型,系统总结了当前多孔介质中生物膜生长建模与数值模拟的研究进展。孔隙尺度模型能够精确刻画微生物定植、EPS 生成与脱落等微观行为,定量描述多孔介质中的复杂耦合过程,并揭示生物膜演化的微观机理。然而,现有孔隙尺度模型在孔隙结构表征和生长动力学机理方面仍存在显著差异,且多数模型仅能模拟简单孔隙结构下的部分关键生物膜演化过程。连续介质尺度模型以连续介质理论为基础,从宏观尺度描述多孔介质中生物膜的动态演化过程。该模型无须显式解析微观孔隙结构,可通过参数化方法表征复杂微观过程,从而显著降低建模难度。然而,该类模型间参数化策略差异较大,在宏观描述中往往未能充分考虑微观异质性,导致难以精确捕捉生物膜-流体界面的相互作用及完整的生物膜动态行为。多尺度模型通过 DBS 或 DDM

表 3 基于 DDM 构建的多尺度生物膜生长模型与数值模拟

Table 3 Summary of multi-scale biofilm growth modeling and numerical simulation studies based on DDM

	耦合	微观特征参数	耦合	宏观等效参数		
作者	方式	Microscopic	方法	Macroscopic	年份	期刊
Author	Coupling	characteristic	Coupling	equivalent	Year	Journal
	scheme	parameters	method	parameters		
Golfier 等 ^[94]	升尺度	多相扩散系数 界面质量通量 浓度、多相体积分	体积平均	有效扩散张量 等效浓度 加权等效浓度、有效 反应系数	2009	<i>Advances in Water Resources</i>
Tang 等 ^[92]	双域耦合	浓度分布、局部反应 速率	边界通量 耦合	有效反应系数	2015	<i>Water Resources Research</i>
Bahar 等 ^[13]	升尺度	扩散通量、孔隙结构 体积分等 浓度分布	体积平均	有效色散张量 质量交换系数	2016	<i>Transport in Porous Media</i>
Yan 等 ^[14]	双域耦合	生物量分布、反应 速率 局部浓度 固-液传质速率 扩散系数	区域参数 统计	有效反应速率 浓度 质量传递系数 平均扩散系数	2017	<i>Water Resources Research</i>
Yousefzadeh 和 Battiato ^[85]	双域耦合	局部对流、扩散通量 流速、浓度分布 微观体积比	界面变量 匹配	平均总通量 宏观输入浓度 几何因子	2017	<i>Journal of Computational Physics</i>
Ray 等 ^[93]	离散-连续 耦合	局部孔隙率 局部扩散张量 生物膜厚度分布、局 部反应速率等	局部结构 更新	有效孔隙率 有效扩散张量 有效反应系数	2017	<i>Advances in Water Resources</i>
Pearce 等 ^[89]	离散-连续 耦合	细胞取向、局部剪 切力	边界耦合	形态对称性指标	2019	<i>Physical Review Letters</i>
Jin 和 Marshall ^[37]	离散-连续 耦合	细胞相互作用力	边界耦合	细胞排列应力	2020	<i>Physics of Fluids</i>
Landa-Marbán 等 ^[91]	升尺度	通道高度、生物膜厚 度与渗透率等 局部浓度分布、反应 速率 孔隙率	渐近展开	有效渗透率 有效反应速率 有效孔隙率	2020	<i>Transport in Porous Media</i>

框架整合微观与宏观信息，显著提升了定量描述生物膜动态行为与反应-迁移过程的能力。基于 DBS

框架的模型采用体积平均法统一描述多区流动，避免显式界面条件；基于 DDM 框架的模型则通过域

分解与界面耦合实现跨尺度模拟。当前该领域面临的核心挑战是跨尺度耦合与参数升尺度,需借助物理上一致的边界条件策略、高精度成像与实验数据融合以提高模拟精度。

未来,生物膜生长过程模型在各个尺度上应聚焦如下问题:(1)在孔隙尺度上,需系统融合高分辨率三维成像与图像处理技术,实现真实孔隙几何的数字化重构,为孔隙尺度模型提供更精确的输入数据;需基于个体模型、连续场理论(CFT)和力学反馈机制等混合建模框架,重点表征多底物竞争、EPS 动态及界面力学行为;需进一步开展微流控实验与生物膜原位观测,验证模型关键参数,并强化多环境因子的动态耦合,以提高模型对真实多孔介质内微观过程的预测精度。(2)在连续介质尺度上,需构建具有明确物理意义的本构关系,例如引入应变依赖的反应-扩散方程和非线性力学模型,从而更真实地描述生物膜生长、变形和脱落等过程;应优化多环境因子的动态耦合参数化方案,为生物膜生长建模提供更为高效的数值框架;模型参数需从实验(如代谢通量分析)和孔隙尺度模拟结果中进行升尺度标定,并借助场地观测数据对模型预测功能进行验证,以增强其在生物修复工程中的适用性。(3)对于多尺度建模,应重点发展基于动态自适应网格、域分解(DDM)或体积平均(DBS)的跨尺度耦合架构,建立微观-宏观变量映射函数与耦合边界条件,以解决界面非物理振荡和信息传递一致性问题;需引入真实孔隙图像导出的非均质性结构,强化多环境因子的动态耦合,并结合多源实验数据(如穿透曲线、生物量分布)进行协同与参数优化,最终形成可支持环境修复决策的仿真系统。

此外,尽管生物膜生长过程模型在土壤与地下水污染治理与生态修复方面具有重要的应用潜力,但这类模型在实际应用中仍面临诸多挑战,包括环境因子动态耦合困难、模型参数依赖实验数据且数据稀缺、模型缺乏场地尺度验证等。为实现上述目标,需优化模型参数与结构,强化模型与实验协同验证,解决当下建模与实验验证中存在的瓶颈问题,从而进一步解析生物膜生长的微观机理,为环境污染治理与生态修复等工程应用提供可靠的理论支撑。

参考文献 (References)

[1] Flemming H C, Wingender J, Szewzyk U, et al. Biofilms;

An emergent form of bacterial life[J]. *Nature Reviews Microbiology*, 2016, 14 (9): 563—575.

[2] Kragh K N, Tolker-Nielsen T, Lichtenberg M. The non-attached biofilm aggregate[J]. *Communications Biology*, 2023, 6: 898.

[3] Rumbaugh K P, Whiteley M. Towards improved biofilm models[J]. *Nature Reviews Microbiology*, 2025, 23 (1): 57—66.

[4] Benioug M, Golfier F, Oltéan C, et al. An immersed boundary-lattice Boltzmann model for biofilm growth in porous media[J]. *Advances in Water Resources*, 2017, 107: 65—82.

[5] de Anna P, Pahlavan A A, Yawata Y, et al. Chemotaxis under flow disorder shapes microbial dispersion in porous media[J]. *Nature Physics*, 2021, 17 (1): 68—73.

[6] Kurz D L, Secchi E, Stocker R, et al. Morphogenesis of biofilms in porous media and control on hydrodynamics[J]. *Environmental Science & Technology*, 2023, 57 (14): 5666—5677.

[7] Scheidweiler D, Bordoloi A D, Jiao W Q, et al. Spatial structure, chemotaxis and quorum sensing shape bacterial biomass accumulation in complex porous media[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 191.

[8] Thomen P, Robert J, Monmeyran A, et al. Bacterial biofilm under flow: First a physical struggle to stay, then a matter of breathing[J]. *PLoS One*, 2017, 12 (4): e0175197.

[9] Costa O Y A, Raaijmakers J M, Kuramae E E. Microbial extracellular polymeric substances: Ecological function and impact on soil aggregation[J]. *Frontiers in Microbiology*, 2018, 9: 1636.

[10] Krause L, Biesgen D, Treder A, et al. Initial microaggregate formation: Association of microorganisms to montmorillonite-goethite aggregates under wetting and drying cycles[J]. *Geoderma*, 2019, 351: 250—260.

[11] Aufrecht J A, Fowlkes J D, Bible A N, et al. Pore-scale hydrodynamics influence the spatial evolution of bacterial biofilms in a microfluidic porous network[J]. *PLoS One*, 2019, 14 (6): e0218316.

[12] Stoodley P, Sauer K, Davies D G, et al. Biofilms as complex differentiated communities[J]. *Annual Review of Microbiology*, 2002, 56: 187—209.

[13] Bahar T, Golfier F, Oltéan C, et al. An upscaled model for bio-enhanced NAPL dissolution in porous media[J]. *Transport in Porous Media*, 2016, 113 (3): 653—693.

[14] Yan Z F, Liu C X, Liu Y Y, et al. Multiscale investigation on biofilm distribution and its impact on macroscopic

- biogeochemical reaction rates[J]. *Water Resources Research*, 2017, 53 (11): 8698—8714.
- [15] Perez L J, Parashar R, Plymale A, et al. Contributions of biofilm-induced flow heterogeneities to solute retention and anomalous transport features in porous media[J]. *Water Research*, 2022, 209: 117896.
- [16] Li X Y, Yang X F. Pore-scale modeling of biofilm formation and biofilm-induced anomalous transport features in heterogenous porous media[J]. *Advances in Water Resources*, 2025, 195: 104877.
- [17] Qin C Z, Hassanizadeh S M. Pore-network modeling of solute transport and biofilm growth in porous media[J]. *Transport in Porous Media*, 2015, 110 (3): 345—367.
- [18] Saravanan A, Kumar P S, Vardhan K H, et al. A review on systematic approach for microbial enhanced oil recovery technologies: Opportunities and challenges[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2020, 258: 120777.
- [19] Gunes B. A critical review on biofilm-based reactor systems for enhanced syngas fermentation processes[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, 143: 110950.
- [20] Xu Z M, Wang J T, Xia L L, et al. A biofouling thermal resistance model with a growth term of surface biofilm on heat transfer surface[J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2021, 161: 106699.
- [21] de Vries H J, Kleibusch E, Hermes G D A, et al. Biofouling control: The impact of biofilm dispersal and membrane flushing[J]. *Water Research*, 2021, 198: 117163.
- [22] Akao P K, Singh B, Kaur P, et al. Coupled microalgal-bacterial biofilm for enhanced wastewater treatment without energy investment[J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2021, 41: 102029.
- [23] Gaol C L, Ganzer L, Mukherjee S, et al. Parameters govern microbial enhanced oil recovery (MEOR) performance in real-structure micromodels[J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2021, 205: 108814.
- [24] Yang X F, Sun H R, Yang Y R, et al. Recent progress in multi-scale modeling and simulation of flow and solute transport in porous media[J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Water*, 2021, 8 (6): e1561.
- [25] Balsa-Canto E, López-Núñez A, Vázquez C. Numerical methods for a nonlinear reaction-diffusion system modelling a batch culture of biofilm[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2017, 41: 164—179.
- [26] Starnoni M, Dawi M A, Sanchez-Vila X. BioReactPy: An open-source software for simulation of microbial-mediated reactive processes in porous media[J]. *Applied Computing and Geosciences*, 2024, 22: 100166.
- [27] Jimenez-Martinez J, Nguyen J, Or D. Controlling pore-scale processes to tame subsurface biomineralization[J]. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 2022, 21 (1): 27—52.
- [28] Orgogozo L, Golfier F, Buès M, et al. Upscaling of transport processes in porous media with biofilms in non-equilibrium conditions[J]. *Advances in Water Resources*, 2010, 33 (5): 585—600.
- [29] Nadell C D, Ricaurte D, Yan J, et al. Flow environment and matrix structure interact to determine spatial competition in *Pseudomonas aeruginosa* biofilms[J]. *eLife*, 2017, 6: e21855.
- [30] Wu Y C, Fu C X, Peacock C L, et al. Cooperative microbial interactions drive spatial segregation in porous environments[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 4226.
- [31] Tang Y N, Valocchi A J, Werth C J, et al. An improved pore-scale biofilm model and comparison with a microfluidic flow cell experiment[J]. *Water Resources Research*, 2013, 49 (12): 8370—8382.
- [32] Arjes H A, Willis L, Gui H W, et al. Three-dimensional biofilm colony growth supports a mutualism involving matrix and nutrient sharing[J]. *eLife*, 2021, 10: e64145.
- [33] Eberl H J, Picioreanu C, Heijnen J J, et al. A three-dimensional numerical study on the correlation of spatial structure, hydrodynamic conditions, and mass transfer and conversion in biofilms[J]. *Chemical Engineering Science*, 2000, 55 (24): 6209—6222.
- [34] Towler B W, Cunningham A, Stoodley P, et al. A model of fluid-biofilm interaction using a Burger material law[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2007, 96(2): 259—271.
- [35] Karimi S, Nakshatrala K B. A hybrid multi-time-step framework for pore-scale and continuum-scale modeling of solute transport in porous media[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 323: 98—131.
- [36] Battiato I, Ferrero V P T, O' Malley D, et al. Theory and applications of macroscale models in porous media[J]. *Transport in Porous Media*, 2019, 130 (1): 5—76.
- [37] Jin X, Marshall J S. Influence of cell interaction forces on growth of bacterial biofilms[J]. *Physics of Fluids*, 2020, 32 (9): 091902.
- [38] Landa-Marbán D, Bødtker G, Vik B F, et al. Mathematical modeling, laboratory experiments, and sensitivity analysis of bioplug technology at darcy scale[J]. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 2020,

- 25 (6): 3120—3137.
- [39] Salek M M, Carrara F, Zhou J D, et al. Multiscale porosity microfluidics to study bacterial transport in heterogeneous chemical landscapes[J]. *Advanced Science*, 2024, 11 (20): 2310121.
- [40] Carrel M, Morales V L, Beltran M A, et al. Biofilms in 3D porous media: Delineating the influence of the pore network geometry, flow and mass transfer on biofilm development[J]. *Water Research*, 2018, 134: 280—291.
- [41] Karimifard S, Li X, Elowsky C, et al. Modeling the impact of evolving biofilms on flow in porous media inside a microfluidic channel[J]. *Water Research*, 2021, 188: 116536.
- [42] Wang S, Zhu H Y, Zheng G X, et al. Dynamic changes in biofilm structures under dynamic flow conditions[J]. *Applied and Environmental Microbiology*, 2022, 88 (22): e01072—01022.
- [43] Bourguignon N, Alessandrello M, Booth R, et al. Bioremediation on a chip: A portable microfluidic device for efficient screening of bacterial biofilm with polycyclic aromatic hydrocarbon removal capacity[J]. *Chemosphere*, 2022, 303: 135001.
- [44] Papadopoulos C, Larue A E, Toulouze C, et al. A versatile micromodel technology to explore biofilm development in porous media flows[J]. *Lab on a Chip*, 2024, 24 (2): 254—271.
- [45] Ceriotti G, Borisov S M, Berg J S, et al. Morphology and size of bacterial colonies control anoxic microenvironment formation in porous media[J]. *Environmental Science & Technology*, 2022, 56 (23): 17471—17480.
- [46] Zhang X K, Wu S, Sun X J, et al. Zooming in to acquire micro-reaction: Application of microfluidics on soil microbiome[J]. *Soil Ecology Letters*, 2022, 4 (3): 213—223.
- [47] Landa-Marbán D, Liu N, Pop I S, et al. A pore-scale model for permeable biofilm: Numerical simulations and laboratory experiments[J]. *Transport in Porous Media*, 2019, 127 (3): 643—660.
- [48] Latt J, Malaspinas O, Kontaxakis D, et al. Palabos: Parallel lattice Boltzmann solver[J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2021, 81: 334—350.
- [49] Pintelon T R R, Picioreanu C, van Loosdrecht M C M, et al. The effect of biofilm permeability on bio-clogging of porous media[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2012, 109 (4): 1031—1042.
- [50] Kurz D L, Secchi E, Carrillo F J, et al. Competition between growth and shear stress drives intermittency in preferential flow paths in porous medium biofilms[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2022, 119 (30): e2122202119.
- [51] Bozorg A, Gates I D, Sen A. Impact of biofilm on bacterial transport and deposition in porous media[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2015, 183: 109—120.
- [52] Aminnaji M, Golfier F, Niasar V J, et al. Interplay of biofilm growth, NAPL biodegradation and micro-scale heterogeneity in natural attenuation of aquifers delineated by pore-network modelling[J]. *Advances in Water Resources*, 2020, 145: 103750.
- [53] Mehmani Y, Balhoff M T. Mesoscale and hybrid models of fluid flow and solute transport[J]. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 2015, 80 (1): 433—459.
- [54] Yang X F, Mehmani Y, Perkins W A, et al. Intercomparison of 3D pore-scale flow and solute transport simulation methods[J]. *Advances in Water Resources*, 2016, 95: 176—189.
- [55] Ferreira T R, Archilha N L, Pires L F. An analysis of three XCT-based methods to determine the intrinsic permeability of soil aggregates[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 612: 128024.
- [56] Liu X Y, Huang H, Zhou Z F, et al. XCT images-based pore-scale numerical investigation for heat transfer using copper foam filled with paraffin phase change material[J]. *Thermal Science and Engineering Progress*, 2025, 59: 103358.
- [57] Wang S J, Cheng Z C, Jiang L L, et al. Quantitative study of density-driven convection mass transfer in porous media by MRI[J]. *Journal of Hydrology*, 2021, 594: 125941.
- [58] Nelson K E. A Lagrangian method for investigating bacterial transport and attachment in the colloid filtration theory [D]. Davis: University of California, Davis, 2004.
- [59] Yao K M, Habibian M T, O'Melia C R. Water and waste water filtration. Concepts and applications[J]. *Environmental Science & Technology*, 1971, 5 (11): 1105—1112.
- [60] Jung H, Meile C. Pore-scale numerical investigation of evolving porosity and permeability driven by biofilm growth[J]. *Transport in Porous Media*, 2021, 139 (2): 203—221.
- [61] Lohrmann C, Holm C. A novel model for biofilm initiation in porous media flow[J]. *Soft Matter*, 2023, 19 (36): 6920—6928.
- [62] More T T, Yadav J S S, Yan S, et al. Extracellular polymeric substances of bacteria and their potential environmental applications[J]. *Journal of Environmental*

- Management, 2014, 144: 1—25.
- [63] Wang Q, Guo S W, Ali M, et al. Thermally enhanced bioremediation: A review of the fundamentals and applications in soil and groundwater remediation[J]. Journal of Hazardous Materials, 2022, 433: 128749.
- [64] Huang X, Zhou T, Chen X, et al. Enhanced biodegradation of high-salinity and low-temperature crude-oil wastewater by immobilized crude-oil biodegrading microbiota[J]. Journal of Ocean University of China, 2022, 21 (1): 141—151.
- [65] Zhang M, Wu Y C, Qu C C, et al. Microbial extracellular polymeric substances (EPS) in soil: From interfacial behaviour to ecological multifunctionality[J]. Geo-Bio Interfaces, 2024, 1: e4.
- [66] Tao J Q, Yang Y L. Construction of an emulsifier-degrader bacterial consortium for petroleum hydrocarbon removal: Performance enhancement at different temperatures[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 74: 107806.
- [67] Aghajani Delavar M, Wang J Y. Numerical investigation of pH control on dark fermentation and hydrogen production in a microbioreactor[J]. Fuel, 2021, 292: 120355.
- [68] Aghajani Delavar M, Wang J Y. Modeling combined effects of temperature and structure on competition and growth of multispecies biofilms in microbioreactors[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2020, 59 (37): 16122—16135.
- [69] Noiriell C, Soulaire C. Pore-scale imaging and modelling of reactive flow in evolving porous media: Tracking the dynamics of the fluid-rock interface[J]. Transport in Porous Media, 2021, 140 (1): 181—213.
- [70] Soulaire C, Maes J, Roman S. Computational microfluidics for geosciences[J]. Frontiers in Water, 2021, 3: 643714.
- [71] Thullner M, Zeyer J, Kinzelbach W. Influence of microbial growth on hydraulic properties of pore networks[J]. Transport in Porous Media, 2002, 49 (1): 99—122.
- [72] Thullner M, Baveye P. Computational pore network modeling of the influence of biofilm permeability on bioclogging in porous media[J]. Biotechnology and Bioengineering, 2008, 99 (6): 1337—1351.
- [73] Stewart T L, Kim D S. Modeling of biomass-plug development and propagation in porous media[J]. Biochemical Engineering Journal, 2004, 17 (2): 107—119.
- [74] Eberl H J, Parker D F, Vanloosdrecht M C M. A new deterministic spatio-temporal continuum model for biofilm development[J]. Journal of Theoretical Medicine, 2001, 3 (3): 161—175.
- [75] Soulaire C, Tchalepi H A. Micro-continuum approach for pore-scale simulation of subsurface processes[J]. Transport in Porous Media, 2016, 113 (3): 431—456.
- [76] Elsayed A, Hurdle M, Kim Y. Comprehensive model applications for better understanding of pilot-scale membrane-aerated biofilm reactor performance[J]. Journal of Water Process Engineering, 2021, 40: 101894.
- [77] Zhang Y, Wang X J, Wang W Q, et al. Investigation of growth kinetics and partial denitrification performance in strain *Acinetobacter johnsonii* under different environmental conditions[J]. Royal Society Open Science, 2019, 6 (12): 191275.
- [78] Policastro G, Luongo V, Frunzo L, et al. A mechanistic mathematical model for photo fermentative hydrogen and polyhydroxybutyrate production[J]. Mathematical Biosciences and Engineering, 2023, 20(4): 7407—7428.
- [79] Monroy I, Guevara-López E, Buitrón G. A mechanistic model supported by data-based classification models for batch hydrogen production with an immobilized photo-bacteria consortium[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2016, 41 (48): 22802—22811.
- [80] Wang J J, Carrera J, Saaltink M W, et al. Biofilm growth in porous media well approximated by fractal multirate mass transfer with advective-diffusive solute exchange[J]. Water Resources Research, 2024, 60 (11): e2023WR036872.
- [81] Knutson C, Valocchi A, Werth C. Comparison of continuum and pore-scale models of nutrient biodegradation under transverse mixing conditions[J]. Advances in Water Resources, 2007, 30 (6/7): 1421—1431.
- [82] Soulaire C. Micro-continuum modeling: An hybrid-scale approach for solving coupled processes in porous media[J]. Water Resources Research, 2024, 60 (2): e2023WR035908.
- [83] Carrillo F J, Bourg I C. Modeling multiphase flow within and around deformable porous materials: A darcy-brinkman-Biot approach[J]. Water Resources Research, 2021, 57 (2): e2020WR028734.
- [84] Mehmani Y, Balhoff M T. Bridging from pore to continuum: A hybrid mortar domain decomposition framework for subsurface flow and transport[J]. Multiscale Modeling & Simulation, 2014, 12 (2): 667—693.
- [85] Yousefzadeh M, Battiatto I. Physics-based hybrid method

- for multiscale transport in porous media[J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, 344: 320—338.
- [86] Molins S, Trebotich D, Arora B, et al. Multi-scale model of reactive transport in fractured media: Diffusion limitations on rates[J]. *Transport in Porous Media*, 2019, 128 (2): 701—721.
- [87] Wang S L, Li X X, Huang L J, et al. Effects of temperature on the multi-scale characteristics of bioclogging in porous media[J]. *Advances in Water Resources*, 2025, 201: 104980.
- [88] Sangha J S, Gogulancea V, Curtis T P, et al. Advancing dental biofilm models: The integral role of pH in predicting *S. mutans* colonization[J]. *mSphere*, 2025, 10 (1): e00743—24.
- [89] Pearce P, Song B Y, Skinner D J, et al. Flow-induced symmetry breaking in growing bacterial biofilms[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123 (25): 258101.
- [90] Dawi M A, Starmoni M, Porta G, et al. Pore-scale coupling of flow, biofilm growth, and nutrient transport: A microcontinuum approach[J]. *Water Resources Research*, 2024, 60 (11): e2024WR038393.
- [91] Landa-Marbán D, Bødtker G, Kumar K, et al. An upscaled model for permeable biofilm in a thin channel and tube[J]. *Transport in Porous Media*, 2020, 132 (1): 83—112.
- [92] Tang Y N, Valocchi A J, Werth C J. A hybrid pore-scale and continuum-scale model for solute diffusion, reaction, and biofilm development in porous media[J]. *Water Resources Research*, 2015, 51 (3): 1846—1859.
- [93] Ray N, Rupp A, Pechtel A. Discrete-continuum multiscale model for transport, biomass development and solid restructuring in porous media[J]. *Advances in Water Resources*, 2017, 107: 393—404.
- [94] Golfier F, Wood B D, Orgogozo L, et al. Biofilms in porous media: Development of macroscopic transport equations *via* volume averaging with closure for local mass equilibrium conditions[J]. *Advances in Water Resources*, 2009, 32 (3): 463—485.

(责任编辑: 檀满枝)