

铜绿微囊藻吸收和散射特性两层球形模型模拟

吕 恒 戴红亮 李云梅 李晓俊 王 瑜 潘洪洲 张 杰

(南京师范大学虚拟地理环境教育部重点实验室, 江苏 南京 210023)

摘要 铜绿微囊藻是我国内陆富营养化湖泊蓝藻水华的主要藻种。将铜绿微囊藻抽象为由细胞质和叶绿体构成的两层球形模型,通过循环迭代的方式确定两层球形模型中叶绿体的体积比例及其折射率的中心值,结合 Kramers-Kronig 关系最终确定两层球形模型细胞质及叶绿体的复折射率,通过 Aden-Kerker 理论结合粒径分布情况模拟出其吸收和散射效率光谱。对比模拟结果与实验结果发现:该模型估算得到的散射光谱与实验的散射光谱之间误差为 3.4%,吸收效率误差为 4.3%,在后向散射模拟实验中,相比均匀球形模型,两层球形模型表现出较好的优越性。

关键词 散射;两层球形模型;Aden-Kerker 理论;铜绿微囊藻

中图分类号 O433 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201333.1229002

Simulating the Light Absorption and Scattering Properties of *Microcystis Aeruginosa* Using a Two-Layered Spherical Geometry

Lü Heng Dai Hongliang Li Yunmei Li Xiaojun Wang Yu

Pan Hongzhou Zhang Jie

(Key Laboratory of Virtual Geographic Environment, Ministry of Education, Nanjing Normal University, Nanjing, Jiangsu 210023, China)

Abstract *Microcystis aeruginosa* is the main species during alga bloom in inland eutrophic lakes. We consider that *Microcystis aeruginosa* consists of cytoplasm and chloroplast for simulating optical characteristics based on the two-layered spherical geometry. The central real refractive index value and volume ratio of chloroplast are calculated through the method of loop iterations. Meanwhile, based on the Kramers-Kronig relationship, the refractive index value of cytoplasm and chloroplast could be obtained. Finally, the absorption and scattering properties of *Microcystis aeruginosa* are simulated using the Aden-Kerker theory and particle size distribution. The results show that the relative errors between modeled and measured scattering and absorption efficiency factors are 3.4% and 4.3%, respectively. In comparison with the simulation based on Mie theory, the two-layered spherical model shows a better simulation accuracy of the backscattering properties.

Key words scattering; two-layered spherical geometry; Aden-Kerker theory; *Microcystis aeruginosa*

OCIS codes 290.0290; 010.1030; 280.1350

1 引 言

Mie 散射理论为藻类散射特性的研究提供了很好的理论支持,目前藻类散射特性的认知很多是通过 Mie 理论模拟获得的^[1-3]。但目前没有直接的证据表明 Mie 理论同样适合后向散射特性的拟合^[4-6]。Witkowski 等^[7-8]研究了内部细胞结构对

散射特性的影响,Stramski 等^[9]在 2003 年研究了 Mie 模型对藻类辐射传输的影响,他们发现细胞的内部结构和非球形细胞形态对藻细胞在大角度方向上的散射特性存在重要的影响。

在利用 Mie 理论和奇异衍射近似理论(ADA)进行散射正演模拟时假定颗粒为均匀球形。然而众

收稿日期: 2013-06-20; 收到修改稿日期: 2013-09-09

基金项目: 国家自然科学基金(41171269)

作者简介: 吕 恒(1977—),男,博士,副教授,主要从事环境遥感方面的研究。E-mail: henglu@njnu.edu.cn

所周知,真核浮游植物细胞内部介质并非均一,而是由各种内膜系统以及细胞器组成^[10]。仅将介质抽象为均一的球形颗粒存在一定的局限性,因此很多学者对藻类细胞形态及内部构成进一步进行细化抽象。周雯等^[10-11]运用两层球形和均匀球形模型,对4种海藻的吸收、散射特性进行模拟研究,并进行了藻类等效粒径分布的反演。Aas^[12]和Bernard^[13]则将细胞抽象为两层球形模型模拟了海藻的后向散射特性。Kitchen等^[14]将细胞抽象为高折射率无吸收的细胞壁、具有吸收特性的复折射率较低的叶绿体以及无吸收特性复折射率较低的细胞核,通过模拟发现,改变细胞壁的厚度将会使得细胞的体散射项函数发生很大变化。Bricaud等^[15]将细胞抽象为细胞壁、细胞核以及叶绿体的三层球形模型,其研究结果表明,细胞内部的异构特性对吸收、散射和衰减光谱特性的估算影响较小,但对后向散射特性的估算存在很大影响。采用多层抽象可以更真实地模拟出藻细胞的后向散射光谱。Quirantes等^[16-18]通过运用两层球形模型和旋转体模型对海洋藻类进行散射特性模拟时,发现颗粒的形状对吸收和散射效率影响不大,但后向散射受颗粒形状影响很大。Zaneveld等^[19]对比了均匀球形模型、两层球形模型以及三层球形模型在藻类吸收带附近的模拟结果,发现三层球形模型模拟值最大,其次为两层球形模型,均匀球形模型模拟值最低。

Aden等^[20-21]早在20世纪中后期就进行了非均质颗粒光学信号值模拟的研究。但是,将这些模拟模型运用到藻细胞光学特性模拟中的研究还较少,其主要原因在于对藻细胞光学特性的先验认知还很少。同时,藻细胞非球形的细胞结构及不同的粒径大小均加大了模拟的难度。

因此,本文针对内陆富营养化湖泊水华的主要藻种——铜绿微囊藻,将其抽象为由两个同心球构成的两层球形模型,一层为高吸收的叶绿体,另一层为决定细胞体积的细胞质,设置叶绿体为外层,细胞质为内层。结合实测值,确定两种抽象介质的折射率实部与虚部,进而模拟出铜绿微囊藻的吸收、散射和后向散射特性,为遥感识别该藻种提供基础。

2 实验材料与方法

2.1 实验材料

铜绿微囊藻藻种购自中国科学院淡水藻种库。铜绿微囊藻隶属于蓝藻门蓝藻纲微囊藻科微囊藻属,细胞形态显球形或半球形。其原生质体显亮蓝

绿色,但是由于气囊的存在,整个细胞显现暗黑色或褐色。气囊为铜绿微囊藻的悬浮提供了可能。通过气囊,铜绿微囊藻能够悬浮于水柱中以获得最适宜的光照及二氧化碳从而促进其生长。

2.2 实验方法

铜绿微囊藻藻种在光照培养箱中培养,培养环境为光合周期比12:12,温度设置为藻类培养的最佳温度25℃,光照强度设置为3000 lux。采用BG11培养液进行培养,pH值为7.1。

2.3 参数测定

粒径分布 $[F(D)]$ 的测定:取1 L原藻液,充分摇匀。启动激光粒度仪Mastersizer 2000,用超纯水测量其光学背景值,添加样品,进行测量,至结果稳定(如图1所示)。铜绿微囊藻的粒度分布峰值对应的等效球直径约为3.468 μm ,并且其粒度服从正态分布。

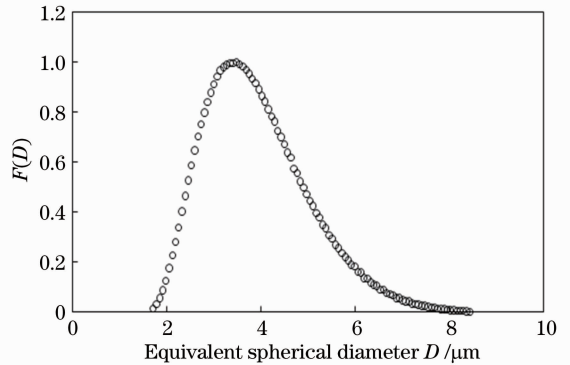


图1 归一化粒度分布

Fig. 1 Peak-normalized particle size distribution for *Microcystis aeruginosa*

浮游植物吸收系数、衰减系数的测定:在藻类生长对数期,用40 L的黑桶装20 L的超纯水。用量筒量取500 mL原始藻液加到超纯水中,以500 mL为梯度,依次加入500、1000、1500、2000、2500、3000、3500、4500 mL纯藻液,充分搅拌后,用50 mL针筒吸取稀释后的水样,分别注入到吸收/衰减仪(ac-s)的吸收管和衰减管中,测量其吸收、衰减系数(如图2所示)。模型构建采用加入500 mL藻液时的浓度梯度,即叶绿素a浓度为29.4624 mg/m^3 ,用来估算两层球形模型复折射率值,而模型的验证采用加入1500 mL藻液的测量记录来验证模型(叶绿素a浓度为109.4498 mg/m^3)。

3 两层球形模型的建立

两层球形模型主要是基于Aden-Kerker理论及Kramers-Kronig关系,其实现流程图如图3所示。

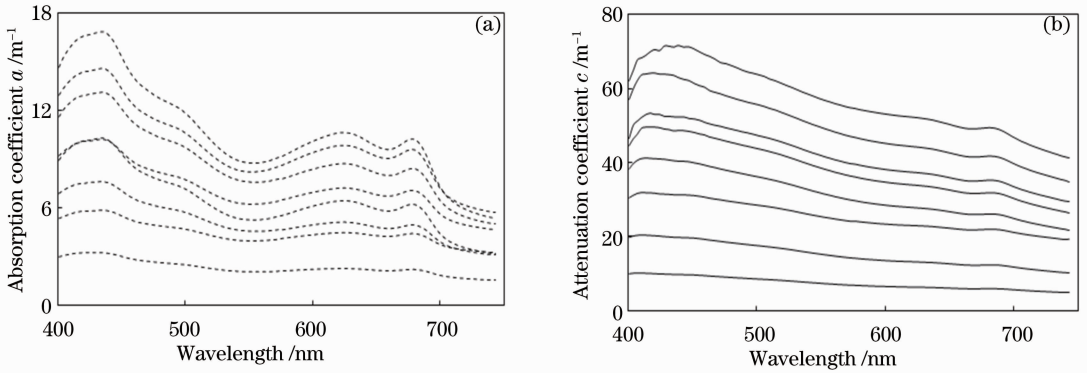


图 2 实测的铜绿微囊藻的(a)吸收系数和(b)衰减系数
Fig.2 Experimental (a) absorption and (b) attenuation coefficients

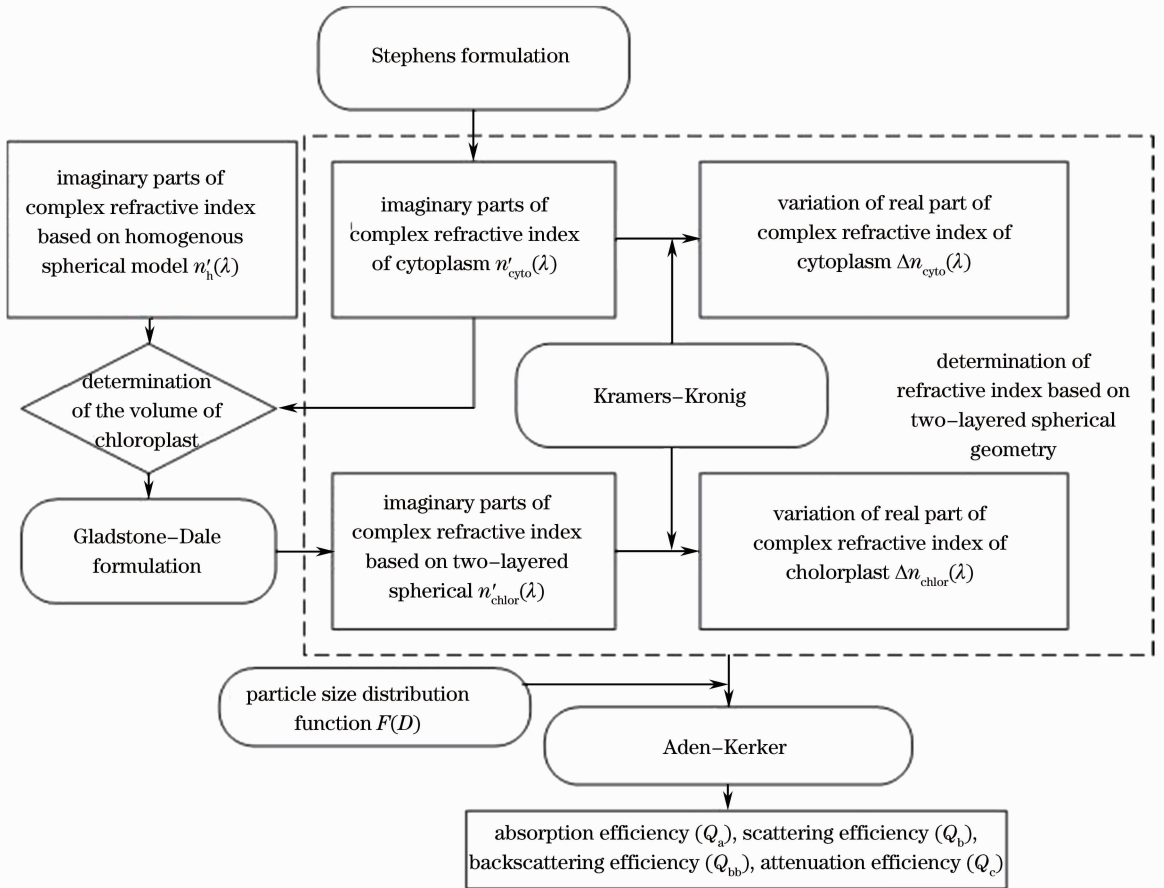


图 3 两层球形模型实现流程图

Fig. 3 Flow chart of simulation using two-layered spherical geometry

其具体流程如下：

- 1) 通过 Stephens 公式, 获得细胞质的折射率虚部值；
- 2) 通过循环迭代叶绿体在细胞颗粒中所占体积, 确定叶绿体的体积；
- 3) 利用均匀球形模型获得的折射率虚部, 结合 Gladstone-Dale 关系式计算出叶绿体的折射率虚部；
- 4) 通过 Kramers-Kronig 关系进而获得两层球

形细胞质的折射率实部变化量和叶绿体折射率实部变化量；

5) 利用 Aden-Kerker 理论, 结合粒径分布函数, 计算求解出吸收、散射、后向散射和衰减效率因子。

3.1 两层球形模型细胞质和叶绿体折射率实部中心值的确定

均匀球形模型中, 折射率实部中心值的变化主

要是由藻类散射值的大小确定的^[1]。同样,两层球形模型中,各细胞质和叶绿体中心值亦有边界范围的限制^[19,21]。

细胞质折射率实部中心值的测量结果如表 1 所示,Charney 等^[22]研究得出细胞质折射率实部中心值为 1.015,该结果也被 Bricaud^[15]等人采纳。而 Kitchen 等^[14,19]则选用 1.02 作为细胞质的折射率实部中心值。该值的变化主要是由于细胞质中的基本成分基质和细胞器的变化所引起的^[23-24]。本文选用 1.02 作为细胞质折射率实部中心值。

对于两层球形模型来说,叶绿体折射率的确定对于模拟结果至关重要。而叶绿体并非是介质均一的物质,其外围包裹着 2~4 层的细胞壁,内部堆积着许多类囊体,为色素和蛋白质的混合物^[14]。类囊体的堆放以及叶绿素的含量又经常变化不定^[25-26],同时,类囊体在光学折射现象中还会发生双折射现象^[27]。类囊体无规律的堆积将在细胞内部产生包裹效应,影响光的吸收。鉴于叶绿体内介质的异构性已经超出了本文的研究范围,因此本文将叶绿体仅视为均质介质来进行运算。

表 1 细胞内部器官折射率实部中心值(1+ε)相关信息(参考 Bernard PhD thesis, 表 4-2)

Table 1 Published median values of the real part of the refractive index (1+ε) for a range of cellular structures (referring Bernard PhD thesis, Table 4-2)

Organism/organ of cell	1+ε	Method	Reference
Spinach/chloroplast	1.065~1.199	Photovoltage	Pailotin <i>et al.</i> 1998
Spinach/chloroplast	1.030~1.060	Immersion/refractometer	Bryant <i>et al.</i> 1969
A. carterae/chloroplast	1.199	Forster transfer	Kleima <i>et al.</i> 2000
Rb. sphaeroides/LHC II	1.220	<i>In vitro</i> absorption shift	Anderrson <i>et al.</i> 1991
Spinach/chloroplast	1.130	<i>In vitro</i> absorption shift	Renge <i>et al.</i> 1996
Maize/chloroplast	1.150~1.179	Forster transfer	Cinque <i>et al.</i> 2000
Zea Mays/chloroplast	1.124	<i>In vitro</i> absorption shift	Caffarri <i>et al.</i> 2001
Secalecaereale/LHC II	1.150~1.390	<i>In vitro</i> absorption shift	Gruszecki <i>et al.</i> 1999
C. pyrenoidosa/chloroplast	1.060	Phase contrast	Charney <i>et al.</i> 1961
Chlorella/chloroplast	1.080	Mueller matrix	Quinby-Hunt <i>et al.</i> 1989
General/chloroplast	1.140~1.150	Lorentz molecular weight	Aas 1996
General/protein	1.132~1.199	Literature review	Aas 1996
Modeled cell/chloroplast	1.095	Assumed model value	Zaneveld <i>et al.</i> 1995
C. pyrenoidosa/cytoplasm	1.015	Phase contrast	Charney <i>et al.</i> 1961
Modeled cell/cytoplasm	1.020	Assumed model value	Kitchen <i>et al.</i> 1992
Modeled cell/cytoplasm	1.015	Assumed model value	Bricaud <i>et al.</i> 1992
Chlorella/cell membrane	1.130	Mueller matrix	Quinby-Hunt <i>et al.</i> 1989
Modelcell/calcitecoating	1.220	Assumed model value	Bricaud <i>et al.</i> 1992
Model cell/cell membrane	1.090	Assumed model value	Zaneveld <i>et al.</i> 1995
Algal/carbohydrate forms	1.162	Literature review	Aas 1996

3.2 两层球形模型细胞质和叶绿体折射率虚部确定

叶绿体折射率的虚部由均匀介质的折射率虚部和细胞质折射率虚部根据体积等效关系获得,为

$$n'_{chlor}(\lambda) = [n'_h(\lambda) - n'_{cyto}(\lambda)V_v]/(1 - V_v), (2)$$

表 1 列出了相关学者研究细胞内部器官折射率实部中心值的结果,从表中可以看出,其变化范围为 1.06~1.22 之间,与均匀球形模型折射率实部中心值 1.01~1.09 相比^[2,28],叶绿体的折射率实部中心值均高于均匀球形模型的折射率实部中心值。如果设置细胞质的折射率实部中心值为 1.02,叶绿体的相对体积为 20%,叶绿体的折射率范围设置为 1.06~1.22,则根据 Gladstone-Dale 关系有

$$1 + \epsilon_h = (1 + \epsilon_{cyto})V_v + (1 + \epsilon_{chlor})(1 - V_v), (1)$$

式中 $1 + \epsilon_h$ 、 $1 + \epsilon_{cyto}$ 、 $1 + \epsilon_{chlor}$ 分别为均匀球形折射率实部中心值、细胞质折射率实部中心值和叶绿体均匀球形的折射率实部中心值, V_v 为叶绿体的体积比例。

通过(1)式计算得到均匀颗粒的平均折射率实部为 1.028~1.060,该值基本与 Bricaud 等^[15]的研究结果一致。戴红亮等^[29]计算出铜绿微囊藻均匀球形模型中,其折射率实部的中心值为 1.0251,通过(1)式,计算出叶绿体折射率实部中心值为 1.0455。

式中 $n'_{cyto}(\lambda)$ 为细胞质的折射率虚部, $n'_h(\lambda)$ 为均匀介质的折射率虚部, V_v 为叶绿体体积比例。

因此,细胞质的折射率虚部值确定也就显得很重要。Stephens^[30]的研究表明,细胞质的弱吸收特

性是由于其由非色素成分构成,并将其折射率的虚部假定为指数衰减形式,为

$$n'_{\text{cyto}}(\lambda) = n'_{\text{cyto}}(400)\exp[-0.01(\lambda - 400)], \quad (3)$$

式中 $n'_{\text{cyto}}(400)$ 为 400 nm 处细胞质的折射率虚部,取值为 0.0005。

3.3 两层球形模型叶绿体和细胞质折射率实部变化量确定

折射率实部的变化量由 Kramers-Kronig 关系计算而得,可以由虚部 $[n'(\lambda)]$ 通过下式算出:

$$\Delta n(\lambda_i) = \frac{2\lambda_i^2 P}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{n'(\lambda)}{\lambda(\lambda_i^2 - \lambda^2)} d\lambda + 1, \quad (4)$$

式中 P 代表柯西定律值。Kramers-Kronig 关系可

以通过 Matlab 中的 Hilbert 变化来实现。

通过设定叶绿体体积比例为 20%,结合 Gladstone-Dale 关系获得叶绿体折射率中心值为 1.0455,并获得细胞质和叶绿体折射率实部变化量及虚部值,如图 4 所示。

3.4 叶绿体体积比例的确定

叶绿体折射率的确定直接影响最终模拟结果的准确率,通过表 2 可知,叶绿体体积比例变化范围在 4.4%~57.0%之间。本文比较了 5%、10%、20%、30%、40%、50%、60% 的叶绿体体积比例,以确定最佳的叶绿体体积。

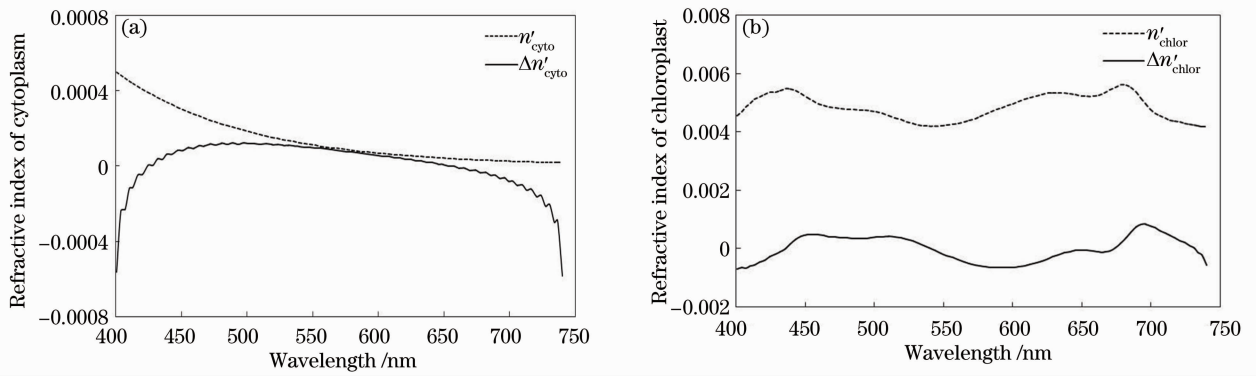


图 4 两层球形模型(a)细胞质及(b)叶绿体折射率实部变化量及虚部值

Fig. 4 Variation of real part of refractive index $\Delta n(\lambda)$ and imaginary part of refractive index $n'(\lambda)$ of (a) cytoplasm and (b) chloroplast

表 2 不同藻种叶绿体体积比例(参考 Bernard PhD thesis, 表 4-1)^[13]

Table 2 Relative chloroplast volume for a range of cultured phytoplankton species under different growth conditions (referring Bernard PhD thesis, Table 4-1)^[13]

Species	Division	PSD	Relative volume	Number of chloroplast	Illumination time /h	Measuring method
<i>Phaeodactylumtricornutum</i>	Bacillariophyte	2.2	20.7	2	5	Av quoted/d from TEM
<i>Phaeodactylumtricornutum</i>	Bacillariophyte	2.2	8.9	2	50	Av quoted/d from TEM
<i>Nannochloropsis</i>	Eustigmophyte	2.7	57	1	35	V _v quoted
<i>Aureococcusanophageferens</i>	Pelagophyte	2.8	12.5	1	-	TEM spheroidal geometry
<i>Pavlova pinguis</i>	Haptophyte	3.6	14.9	1	-	TEM spheroidal geometry
<i>Amphidiniumcarterae</i>	Dinophyte	4.3	26.4	1	-	V _v quoted
<i>CryptomonasIis</i>	Cryptophyte	4.9	25.8	2	10	Av quoted
<i>Chlamydomonasapplanata</i>	Cryptophyte	5.1	52	1	30	V _v quoted
<i>Cyclotellaeryptica.</i>	Bacillariophyte	5.7	19.8	-	5	Av quoted/d from TEM
<i>Cyclotellaeryptica.</i>	Bacillariophyte	6.4	4.4	-	50	Av quoted/d from TEM
<i>Symbiodiniumspp.</i>	Dinophyte	8.1	17	-	50	V _v quoted
<i>Symbiodinium spp.</i>	Dinophyte	8.1	33	-	5	V _v quoted
<i>Cyclotellameneghiniana</i>	Bacillariophyte	16.1	21.5	-	10	V _v quoted
<i>Cyclotellameneghiniana</i>	Bacillariophyte	16.1	28.6	-	107	V _v quoted
<i>Glenodiniopsissteinii</i>	Dinophyte	16.8	24.8	1	155	V _v quoted
<i>Nannochloropsis</i>	Eustigmophyte	2.7	29	1	650	V _v quoted
<i>Amphidiniumcarterae</i>	Dinophyte	4.3	16.7	1	-	V _v quoted
<i>CryptomonasIis</i>	Cryptophyte	7.3	7.6	2	260	Av quoted
<i>Diatomatenue</i>	Bacillariophyte	7.8	16	-	200	V _v quoted

通过循环迭代叶绿体体积比例,可以获得不同比例下叶绿体折射率虚部和实部变化量,如图 5 所示。从图 5(a)可以看出,叶绿体折射率虚部变化值在 0.003~0.012 范围内波动,随着叶绿体体积比例的增加,铜绿微囊藻叶绿体折射率虚部值增加,波形相似。当叶绿体体积逐渐变大时,其折射率虚部增

加值愈发明显。叶绿体折射率实部变化量[图 5(b)]在 0 值附近上下波动,随着叶绿体体积比例的增加,其波峰波谷也逐渐突出,波形更为曲折。同时,通过 Gladstone-Dale 关系式获得叶绿体折射率实部中心值,如图 5(c)所示。随着叶绿体体积比例的增加,其折射率实部中心值呈现曲线式增长。

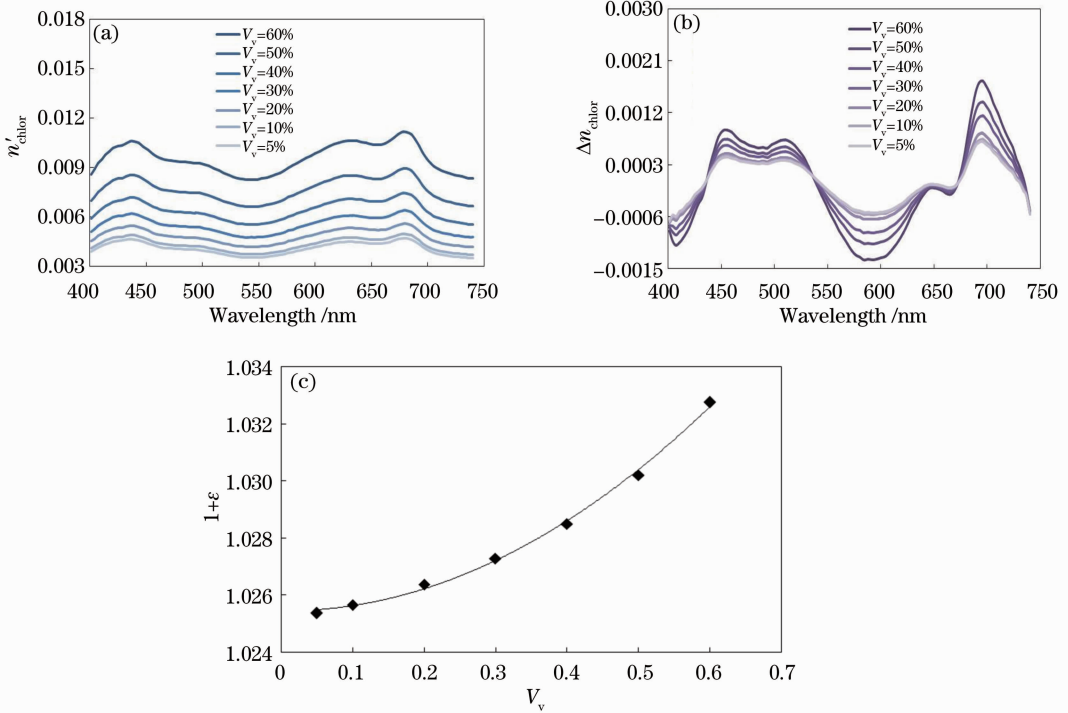


图 5 不同叶绿体体积比例下叶绿体复折射率。(a)复折射率虚部;(b)复折射率实部变化量;(c)复折射率实部中心值
Fig. 5 Complex refractive index under the condition of different volume ratios of chloroplast. (a) Imaginary part of refractive index; (b) variation of real part of refractive index; (c) median value of real part of refractive index

通过循环迭代获得不同叶绿体体积比例下的折射率,结合 3.3 节获得的细胞质的折射率,代入 Aden-Kerker 模型,计算出铜绿微囊藻在不同叶绿体比例下的吸收效率和散射效率值,结果如图 6 所示。从图中可以看出,随着叶绿体体积比例的增加,吸收效率和散射效率都逐渐增加,当叶绿体体积比

例达到最大值时,其相应的吸收和散射效率值也达到最大值。模拟的吸收效率值变化范围为 0.1~0.5 之间,该范围包含实测的吸收效率值区间;而模拟的散射效率值范围为 0.03~0.14 之间,实测的散射效率值范围为 0.2~0.6,模拟值远低于实测的散射效率值。

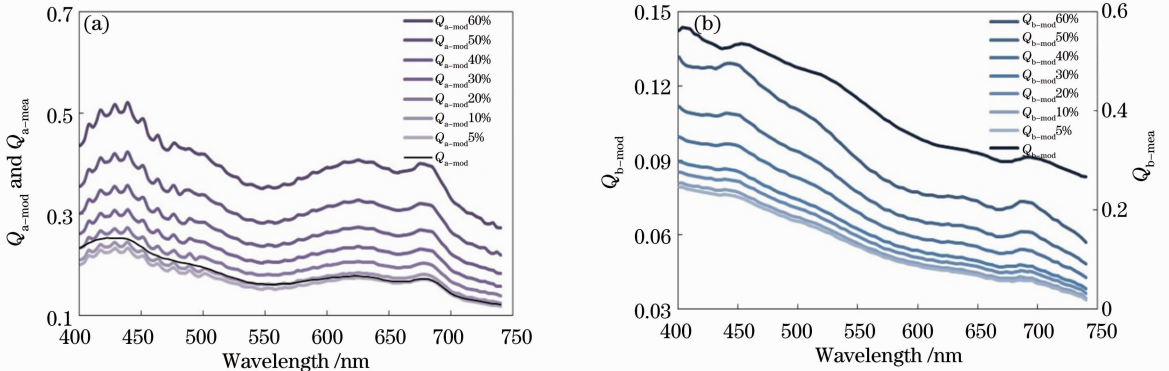


图 6 不同叶绿体体积比例下的吸收和散射模拟值
Fig. 6 Simulation values of Q_a and Q_b at different volume ratios of chloroplast

对比实测吸收效率值发现,铜绿微囊藻在 440~550 nm 区间实测吸收效率值介于叶绿素体积比 10%~20%的模拟值之间,在 550~750 nm 区间,其实测值介于 5%~10%的模拟值之间。图 7 为不同叶绿体体积比例下吸收效率和散射效率模拟值与实测值之间的误差。通过统计模拟值和实测值的平均相

对误差发现,当叶绿体体积比例为 10%时,其吸收效率模拟值与实测值之间的平均相对误差和均方根误差都达到最小值;当叶绿体体积比例逐渐增加时,其平均相对误差和均方根误差也随之增加。而散射效率模拟值远低于实测值,并且随着叶绿体体积比例的增加,其平均相对误差和均方根误差变化不明显。

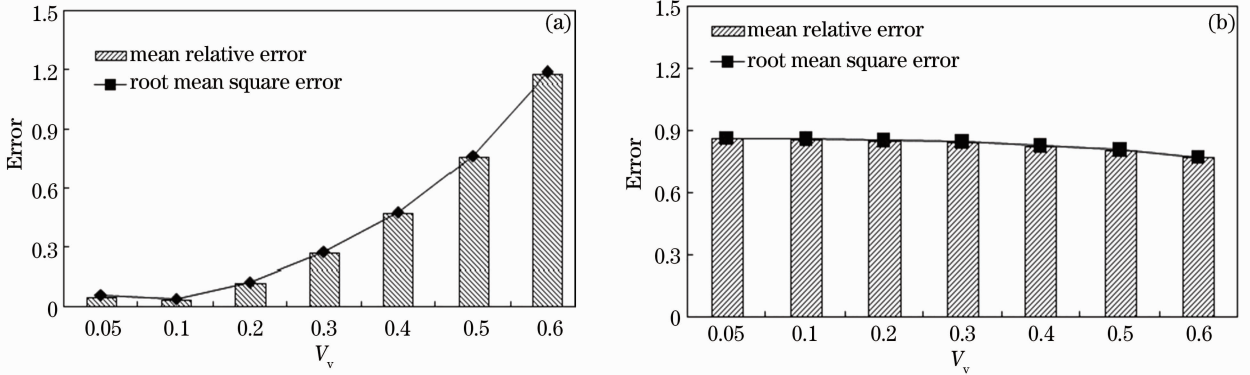


图 7 不同叶绿体体积比例下(a)吸收效率和(b)散射效率模拟值与实测值之间的平均相对误差和均方根误差

Fig. 7 Mean relative error and root mean square error between measured value and simulation value of (a) absorption efficiency and (b) scattering efficiency using model at different volume ratios of chloroplast

通过以上分析发现,两层球形模拟中,叶绿体的体积比例对模拟吸收效率值的影响比较显著,当叶绿体体积比例变化时,其模拟值变化明显,并且随着体积比例的增加,模拟误差增大。比较 7 种不同叶绿体体积比例模拟结果发现,铜绿微囊藻的叶绿体体积比例设置为 10%时,模拟值与实测值最为接近,因此两层球形模型中,叶绿体的体积比例设定为 10%。而叶绿体体积比例的变化对散射效率值的影响并不显著,当叶绿体体积比例逐步增加时,其实测值也相应增长,但是其模拟误差并未有显著降低,如图 7(b)所示,这可能是受叶绿体折射率实部中心值的影响,叶绿体折射率实部中心值的确定将在 3.5 节讨论。

3.5 叶绿体折射率实部中心值的确定

通过 3.4 节讨论发现,铜绿微囊藻两层球形散射效率模拟值与实测值相差很大。同时,叶绿体体积比例的改变,未能提高散射效率值的模拟精度。这是因为叶绿体折射率实部中心值有可能是影响散射特性模拟精度值的因素之一。因此探讨了不同叶绿体折射率实部中心值下,其散射特性模拟值的变化情况。表 1 列出文献报道的叶绿体折射率实部中心值的变化范围为 1.015~1.39。因此,用循环迭代的方法确定合适的叶绿体折射率实部中心值。

运用 Aden-Kerker 模型,计算出不同叶绿体折射率实部中心值,如图 8 所示。当叶绿体折射率实部中心值不断增加时,其相应的吸收效率值和散射

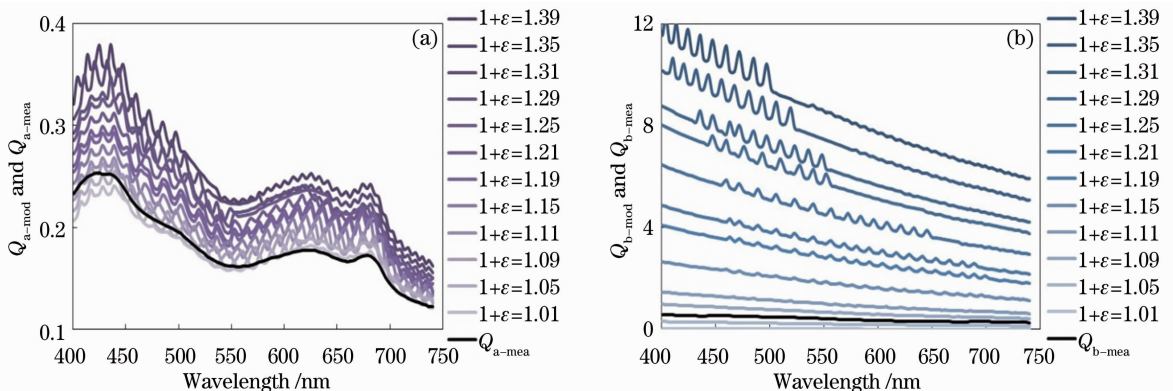


图 8 不同叶绿体实部中心值下的(a)吸收和(b)散射效率模拟值

Fig. 8 Simulation values of (a) Q_a and (b) Q_b at different median values of chloroplast

效率值也相应增加,并且波动也愈发剧烈,引入的噪声也愈多。吸收效率值的变化范围为 0.1~0.4,散射效率值的变化范围在 0~12,它们均包含实测的效率值。同时,对比实测效率值发现,实测吸收效率值和散射效率值均介于叶绿体折射率中心值在 1.05~1.09 的模拟曲线之间。

图 9 给出的是不同叶绿体折射率实部中心值情况下,模拟吸收效率值和散射效率值与实测值之间的平均相对误差和均方根误差。从图 9 可以看出,随着叶绿体折射率实部中心值的增加,模拟的吸收和散射效率值均不同程度增大。吸收效率误差最小值出现在叶绿体折射率实部中心值为 1.01 处,其平均相对误差为 4.06%,均方根误差为 0.038,且在

1.01~1.09 之间其平均相对误差均在 10% 以下。而散射效率误差最小值在折射率实部中心值为 1.05 处,其平均相对误差为 4.91%,均方根误差为 0.492,在 1.01~1.09 之间其平均相对误差均在 10% 以下。吸收效率模拟值误差增幅不大,叶绿体折射率实部中心值为 1.39 处的误差仅为误差最小值的 10 倍;而散射效率模拟值的误差变化很大,叶绿体折射率实部中心值为 1.39 处的误差为误差最小值的 40 倍。因此,缩小叶绿体折射率实部中心值范围至 1.01~1.09,以 0.005 为搜索步长,以期找到最佳的叶绿体折射率实部中心值。图 10 是叶绿体实部中心值在 1.01~1.09 的吸收和散射模拟值。

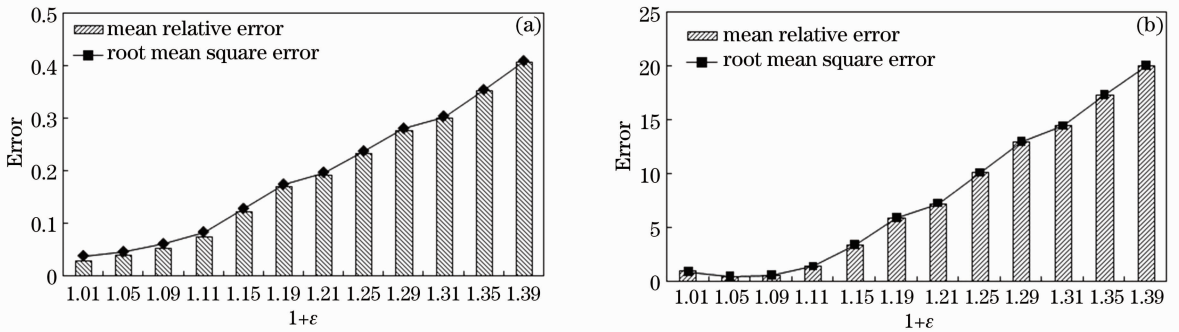


图 9 不同叶绿体折射率实部中心值下(a)吸收效率和(b)散射效率模拟与实测值之间的误差

Fig. 9 Error between measured value and simulation value of (a) absorption efficiency and (b) scattering efficiency using model at different median values of real part of refractive index of chloroplast

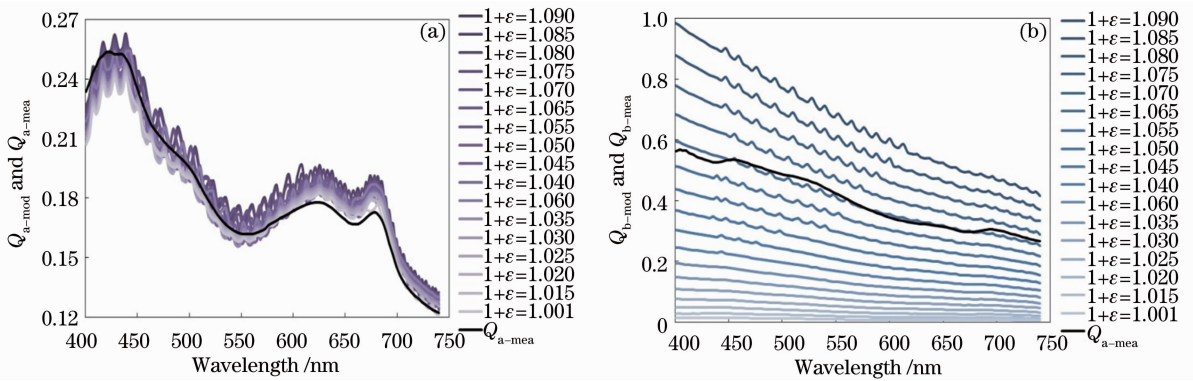


图 10 不同叶绿体折射率实部中心值下的(a)吸收和(b)散射效率模拟值

Fig. 10 Simulation values of (a) Q_a and (b) Q_b at different median values of real part of refractive index of chloroplast

结果表明吸收效率模拟误差在 8% 以下,误差最小值在 1.01 处,而散射效率模拟误差变化很大,误差最小值在 1.07 处,同时该处吸收效率模拟误差也出现谷值(如图 11 所示)。

因此,叶绿体折射率实部中心值确定为 1.07,结合叶绿体的体积比例 10% 以及 3.3 节获得的细胞质的折射率,运用 Aden-Kerker 模型得到铜绿微囊藻吸收和散射效率因子。计算其平均相对误差和

均方根误差,吸收效率模拟值与实测值之间平均相对误差为 3.48%,均方根误差为 0.043;散射效率模拟值与实测值之间平均相对误差为 2.92%,均方根误差为 0.034。

对比实测效率值与模拟值发现,吸收和散射效率模拟波谱曲线与实测波谱曲线相接近(如图 12 所示)。但是,模拟的吸收波谱曲线不够平滑,在 400~750 nm 区间内有许多细小的波动,这一现象也出现

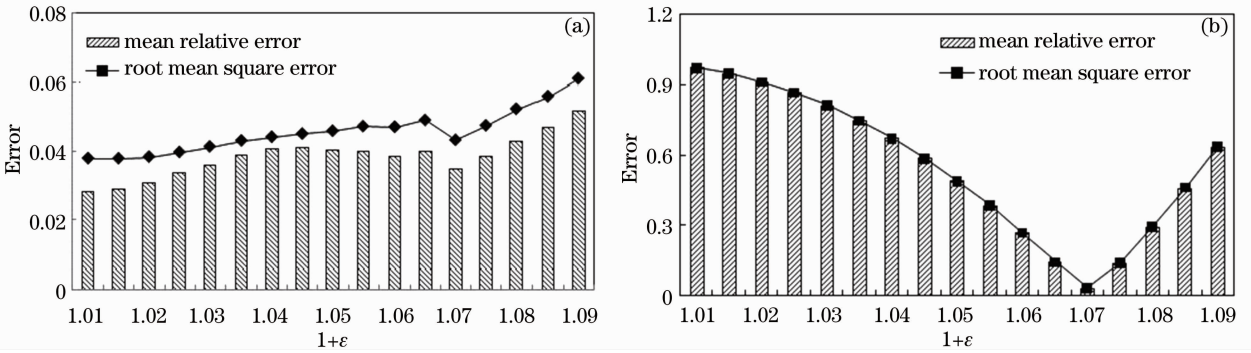


图 11 不同叶绿体折射率实部中心值下(a)吸收效率和(b)散射效率模拟与实测值之间的误差

Fig. 11 Error between measured value and simulation value of (a) absorption efficiency and (b) scattering efficiency using model at different median values of real part of refractive index of chloroplast

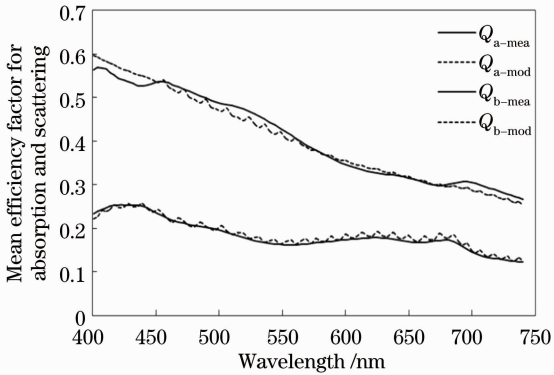


图 12 理论模拟的平均散射、吸收效率光谱与实验结果的比较

Fig. 12 Comparison of mean efficiency factors of absorption and scattering between theoretical spectra and experimental spectra

在模拟的散射波谱曲线 450~550 nm 区间段。从以上分析可以看出,随着叶绿体折射率实部中心值的增加,其吸收和散射模拟波谱曲线粗糙度也逐渐加大。而通过 Gladstone-Dale 体积等效关系计算出叶绿体体积比例为 10% 时的叶绿体折射率实部中

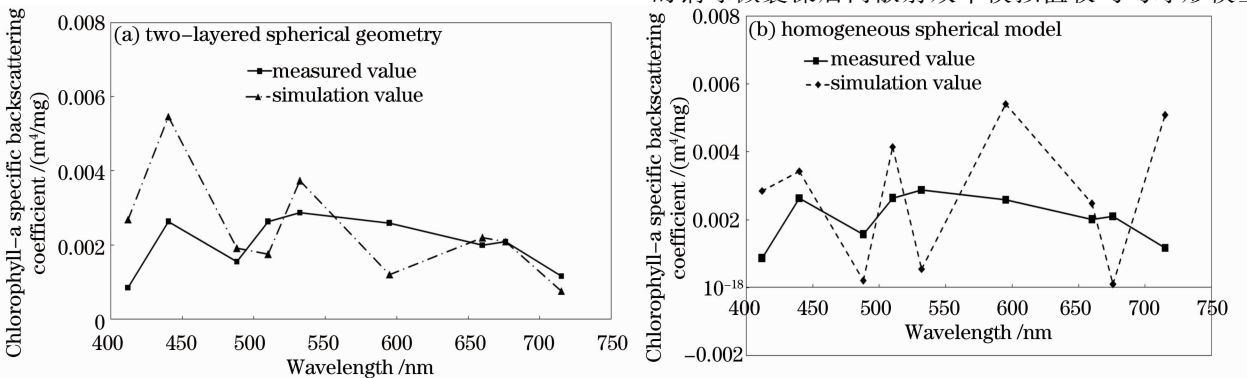


图 13 理论模拟的平均后向散射效率光谱与实验结果的比较

Fig. 13 Comparison of mean efficiency factors of backward scattering between theoretical spectrum and experimental spectrum

心值为 1.026。因此,该处的波动主要是因为叶绿体折射率实部中心值较大导致的。但是,如果设置较小的叶绿体折射率实部中心值,其散射模拟值又远小于实测模拟值。

4 结果与讨论

对比均匀球形^[29]和两层球形模拟结果(如表 3 所示)发现,两个模型的吸收效率模拟结果相差不大,两层球形模型均方根误差相对较小,但是从波谱曲线来看,两个模型模拟的大致形态与实测值相当,但均匀球形模型模拟的波谱曲线较平滑,两层球形模型模拟的波谱上出现许多微小的波峰波谷。两模型的散射效率模拟结果相差较大,均匀球形模型散射模拟值误差是两层球形模型模拟误差的 3 倍。

通过循环迭代,找到最佳的叶绿体体积比例 10% 及叶绿体折射率实部中心值 1.07,结合细胞质折射率,运用 Aden-Kerker 理论,模拟出铜绿微囊藻后向散射效率,如图 13 所示,两层球形模拟获得的铜绿微囊藻后向散射效率模拟值较均匀球形模型

模拟所获得的模拟值精度更高。前者在 440、532、595 nm 出现后向散射谷值。660 nm 附近均出现后向散射峰值,而在 510 nm 和

表 3 均匀球形模型与两层球形模型结果对比

Table 3 Comparison of results between two-layered spherical geometry and homogeneous spherical model

	Homogeneous spherical model	Two-layered spherical geometry
Absorption efficiency	0.048	0.043
Scattering efficiency	0.1006	0.034

5 结 论

对于微囊藻散射和后向散射模拟,两层球形散射模拟值误差仅为均匀球形模型模拟误差的 1/3,其后向散射模拟的峰值位置与实测后向散射波谱相一致,而谷值位置与实测值略有偏差。结果表明两层球形模型表现出较好的优越性,减小了模拟的误差,更好地逼近了真实值。其主要原因在于两层球形模型将铜绿微囊藻进一步抽象为由叶绿体和细胞质组成的两个同心球所构成。但是,利用两层球形模型进行模拟时,当叶绿体折射率实部中心值越大或体积比例越高时,其吸收、散射效率波谱曲线将越为抖动,曲线越不平滑。

参 考 文 献

- 1 A Bricaud, A Morel. Light attenuation and scattering by phytoplanktonic cells: a theoretical modeling [J]. Appl Opt, 1986, 25(4): 571-580.
- 2 Y-H Ahh, A Bricaud, A Morel. Light backscattering efficiency and related properties of some phytoplankters [J]. Deep Sea Res A, 1992, 39(11-12): 1835-1855.
- 3 D Stramski, A Bricaud, A Morel. Modeling the inherent optical properties of the ocean based on the detailed composition of planktonic community [J]. Appl Opt, 2001, 40(18): 2929-2945.
- 4 M S Quinby-Hunt, A J Hunt, K Lofftus, *et al.*. Polarized-light scattering studies of marine chlorella [J]. Limnol Oceanogr, 1989, 34(8): 1587-1600.
- 5 H Volten, J F de Haan, J W Hovenier, *et al.*. Laboratory measurements of angular distributions of light scattered by phytoplankton and silt [J]. Limnol Oceanogr, 1998, 43(6): 1180-1197.
- 6 R D Vaillancourt, C W Brown, R R L Guillard, *et al.*. Light backscattering properties of marine phytoplankton: relationships to cell size, chemical composition and taxonomy [J]. J Plankton Res, 2004, 26(2): 191-212.
- 7 K Witkowski, L Wolinski, Z Turzynski, *et al.*. The investigation of kinetic growth of *Chlorella vulgaris* cells by the method of integral and dynamic light scattering [J]. Limnol Oceanogr, 1993, 38(7): 1365-1372.
- 8 K Witkowski, T Krol, A Zielinski, *et al.*. A light-scattering matrix for unicellular marine phytoplankton [J]. Limnol Oceanogr, 1998, 43(5): 859-869.
- 9 D Stramski, J Piskozub. Estimation of scattering error in spectrophotometric measurements of light absorption by aquatic particles from 3-D radiative transfer equation [J]. Appl Opt, 2003, 42(18): 3634-3646.
- 10 Zhou Wen. A Theoretical Modeling of Scattering Properties

about Phytoplankton [D]. Beijing: Graduate University of Chinese Academy of Sciences, 2008. 89.

周雯. 浮游植物光散射特性理论模拟[D]. 北京: 中国科学院研究生院, 2008. 89.

- 11 Zhou Wen, Cao Wenxi, Li Cai, *et al.*. Spectral scattering property of phytoplankton calculated by absorption coefficient and size distribution [J]. Acta Optica Sinica, 2008, 28(8): 1429-1433.
- 12 E Aas. Influence of Shape and Structure on Light Scattering by Marine Particles [R]. Dept Geophys, Univ Oslo, 1984.
- 13 S Bernard. The Bio-Optical Detection of Harmful Algal Blooms [D]. Cape Town: University of Cape Town, 2005.
- 14 J C Kitchen, J R V Zaneveld. A three-layered sphere model of the optical properties of phytoplankton [J]. Limnol Oceanogr, 1992, 37(8): 1680-1690.
- 15 A Bricaud, J R V Zaneveld, J C Kitchen. Backscattering efficiency of coccolithophorids: use of a three-layered sphere model [C]. SPIE, 1992, 1750: 27-33.
- 16 A Quirantes, S Bernard. Light scattering methods for modeling algal particles as a collection of coated and/or nonspherical scatters [J]. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 2006, 100(1-3): 315-324.
- 17 A Quirantes, S Bernard. Light scattering by marine algae: two-layer spherical and nonspherical models [J]. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 2004, 89(1-4): 311-321.
- 18 A Quirantes, A V Delgado. Scattering cross sections of randomly oriented coated spheroids [J]. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 2001, 70(3): 261-272.
- 19 J R V Zaneveld, J C Kitchen. The variation in the inherent optical properties of phytoplankton near an absorption peak as determined by various models of cell structure [J]. J Geophys Res, 1995, 100(C7): 13309-13320.
- 20 A L Aden, M Kerker. Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres [J]. J Appl Phys, 1951, 22(10): 1242-1246.
- 21 R A Meyer. Light scattering from biological cells; dependence of backscatter radiation on membrane thickness and refractive index [J]. Appl Opt, 1979, 18(5): 585-588.
- 22 E Charney, F S Brackett. The spectral dependence of scattering from a spherical alga and its implications for the state of organization of the light-accepting pigments [J]. Arch Biochem Biophys, 1961, 92(1): 1-12.
- 23 E Aas. Refractive index of phytoplankton derived from its metabolite composition [J]. J Plankton Res, 1996, 18(12): 2223-2249.
- 24 D Stramski. Refractive index of planktonic cells as a measure of cellular carbon and chlorophyll a content [J]. Deep Sea Res A, 1999, 46(2): 335-351.
- 25 B H Rosen, R L Lowe. Physiological and ultrastructural responses of *Cyclotella meneghiniana* (bacillariophyta) to light intensity and nutrient limitation [J]. J Phycol, 1984, 20(2): 173-183.

- 26 T Berner, Z Dubinsky, K Wyman, *et al.*. Photoadaptation and the “package” effect in *Dunaliella tertiolecta* (chlorophyceae) [J]. *J Phycol*, 1989, 25(1): 70–78.
- 27 G Paillotin, W Leibl, J Gapinski, *et al.*. Light gradients in spherical photosynthetic vesicles [J]. *Biophys J*, 1998, 75(1): 124–133.
- 28 A Bricaud, D Stramski. Spectral absorption coefficients of living phytoplankton and nonalgal biogenous matter: a comparison between the Peru upwelling area and the Sargasso Sea [J]. *Limnol Oceanogr*, 1990, 35(3): 562–582.
- 29 Dai Hongliang, Lü Heng, Li Yunmei, *et al.*. A theoretical modeling of light absorption and scattering properties about *Microcystis aeruginosa* [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(6): 1462–1467.
戴红亮, 吕 恒, 李云梅, 等. 铜绿微囊藻吸收和散射特性理论模拟[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(6): 1462–1467.
- 30 F C Stephens. Variability of spectral absorption efficiency within living cells of *Pyrocystis lunula* (dinophyta) [J]. *Mar Biol*, 1995, 122(2): 325–331.

栏目编辑：李志兰