海洋黏液的数学模型：以巴斯克海岸的$liga$ 为例

Charles PIERRE* Guy VALLET†

2023年1月9日

arXiv:2301.03476v2 [math.NA] 9 Mar 2023

摘要

本文研究营养限制条件下硅藻产生黏液的建模问题。最初的问题源于对阿基坦海岸所谓“liga”现象的观察。本文根据现有文献介绍并讨论了这一现象的生物学起源，并提出一个数学模型，分析其理论性质：适定性以及相对于模型参数的可微性。最后，本文通过数值实验探讨利用恒化器型实验对该模型进行参数辨识的可能性。

关键词：浮游植物、生态模型、硅藻、黏液、数学模型、微分方程组、参数辨识。

AMS 分类：37N25 ,92D25 ,92D40.

1 引言

由海洋黏液构成的远洋泥在亚得里亚海（参见例如 [2, 19, 25, 51, 26]）和马尔马拉海 [1, 6], 中都有详尽记载；在大西洋的巴斯克海岸也能观察到这种现象，当地称之为$liga$ [4]。过去几十年间，liga 偶尔会在春季出现在巴斯克海岸，而自 21 世纪初以来，其发生频率、数量和持续时间一直稳步增加。渔民报告称，这一现象急剧加剧，渔网常被 liga 堵塞。水质恶化表明沿海生态系统健康状况不佳。海洋黏液过量生成与浮游植物藻类水华有关，这些水华可能有害（某些情况下会导致毒素释放），并可能对当地生态系统以及渔业和水产养殖活动造成负面影响。

如 [67], 所示，liga是一个源自巴斯克语的词，源于$”ligarda”$，意为一种黏稠的液体。Liga是一种远洋海洋黏液，外观浓稠、呈凝胶状，并形成宏观聚集体。聚集体由透明胞外聚合物颗粒 （TEP）造成：即胞外有机颗粒，见 [49]。此类聚集体的存在与一类藻类高度相关：硅藻，这是一种单细胞浮游植物物种。事实上，在 [16, 67], 中分析的liga样本里，总是系统性地发现各种硅藻物种的浓度很高。liga、TEP与硅藻水华之间的关系将在第2.1节进一步讨论。

liga 的形成发生在咸水与淡水混合的区域。liga 生成的早期阶段对应于远洋胶体聚集体，其出现时呈泥状，正如渔网在捕捞过程中积聚的泥状物。在稳定的反气旋条件下，它有时间成熟为远洋黏液团，并可能在水柱中迁移。根据水文气候

*charles.pierre@univ-pau.fr，LMAP UMR- 法国国家科学研究中心 5142，IPRA BP 1155，64013 波城 Cedex，法国。
†guy.vallet@univ-pau.fr，LMAP UMR- 法国国家科学研究中心 5142，IPRA BP 1155，64013 波城 Cedex，法国。

条件及其生物组成，它可能以黏液团的形式沉降至海底，也可能以漂浮苔藓的形式到达海面。liga 会形成暂时性的远洋生态系统，其中包含种类繁多的微生物（病毒、细菌、浮游植物和浮游动物）。通常每年会观测到两次 liga 暴发：分别在春季和秋季。它会在冬季第一场风暴来临时消失，但在冬季反气旋条件下可能以较低强度再次出现。

liga生成情景如下：在适宜的环境条件下，硅藻会发生水华（或显著增殖），随后分泌黏液。当种群密度和黏液浓度足够高时，黏液便会聚集并形成liga，参见例如 [49, 补充材料 S2)]）。

关于硅藻等生物产生黏液的研究 [57] 表明，细胞内营养物浓度失衡可能会诱发黏液生成，而这可能只是一种用于平衡细胞化学计量关系的稳态机制。第 2.2 节将讨论这一假设，并提出营养盐碳氮比失衡这一观点。

本文旨在提出一个硅藻种群生成liga的模型。本文考虑将碳氮失衡视为黏液生成的触发因素，并将基于硅藻对碳和氮的吸收提出一个双营养盐模型。

本文结构如下：第 2 节介绍硅藻、水华及liga形成的原因。第 3 节介绍liga生成的数学模型。随后将对该模型进行数学研究，包括解的存在性与唯一性、若干定性信息，以及解对模型参数的稳定性。最后一节将对该模型进行数值研究。首先介绍一个能够诱导黏液生成的模型生物学设定，然后分析能否基于恒化器实验对模型进行参数辨识。

2 硅藻

硅藻是棕色单细胞浮游植物藻类，具有一种称为硅壳的硅质外壳。硅壳由两部分组成，构成硅质细胞壁，将真核原生质体包裹其中。它既能保护原生质体，也为营养物摄取、气体交换和胞外分泌物提供通道。

在大多数情况下，硅藻生活史在营养生长期（持续数月或数年）和复壮期（数天）之间交替，复壮期通常由有性生殖引发 [61, 63]。
硅藻有一个或两个细胞质液泡，具有多种功能。液泡中储存着易于动用的储备物质，以应对条件较差的时期或物质短缺。正如 [65]中所指出的，硅壳为液泡提供支撑结构，并保护营养盐，避免其被竞争者获取，以供后续细胞分裂使用。

2.1 Liga、透明胞外聚合物颗粒与硅藻水华

如引言所述，黏液聚集是由透明胞外聚合物颗粒[1], see [49]引起的。硅藻液泡是营养盐的重要来源，尤其是 $\beta - 1$，3-葡聚糖硅藻糖胶（一种碳水化合物）；根据 [60], ，它有助于胞外聚合物的生成。事实上，硅藻会分泌胞外聚合物质 （胞外聚合物质），在适宜条件下构成透明胞外聚合物颗粒生成的前体；这些颗粒与其他有机物颗粒混合后，便转化为海洋雪 [35, 49, 54]。透明胞外聚合物颗粒是浮力颗粒，理应悬浮于表层水域；其下沉与聚集体的尺寸、孔隙度和密度有关。压载作用可能源于重矿物或大气尘埃的掺入 [49], ，也可能来自溢油残留等现代污染 [14, 35]。在 [9], 作者

[1]透明胞外聚合物颗粒（TEP）

注意到，硅藻在水华期间还会释放多不饱和醛，这些醛有助于增大透明胞外聚合物尺寸并形成更大的聚集体。

在巴斯克海岸，liga 通常会在春季出现第一轮，秋季出现第二轮，主要伴随硅藻水华 [67]。[68] 报道称，liga 水华中发现的主要硅藻物种有*Ceratoneis closterium*（始终可见）、***Leptocylindrus danicus***（2013年6月）、***Pseudo Nitzschia B2*与*B1*组**（2013年10月）和*Thalassiosira gravida*（2014年3月）。在liga大量出现时，还发现了以下物种：硅藻（除上述物种外，还有舟形藻属、***Guinardia flaccida***、*Leptocylindrus minimus*、*Guinardiadelicatula*、*Rhizosoleniasetigera*）；甲藻（*Protoperidinium oceanicum*）；胶质浮游动物（管水母目***Diphiidae***科、尾海鞘属、*Sagitta sp*）。

硅藻浓度通常在春季初期和秋季较高，此时营养盐再次变得充足，光照强度和日照时长也较为适宜。此外，众所周知，藻华往往由硅藻水华引发。亚得里亚海的情况便是如此：在营养限制条件下，硅藻***Cylindrotheca closterium*** 参与胞外碳水化合物的生产，见 [2]。这其中有几个原因。首先， [3] 指出，尿素的功能循环使硅藻在其他浮游植物类群受到氮限制时具有生态优势 [16, 46, 66]。此外，硅藻的棕色色泽表明其含有类胡萝卜素；类胡萝卜素与叶绿素a 和c共同作用，可实现高效的光合捕光。最后，硅藻能够进行C4光合作用，使其能更有效地利用可用的CO_2, ，尤其是在条件不太有利时 [61]。

研究人员还通过数学模型和统计数据分析，探讨了环境条件转好时硅藻比其他物种生长更有效的能力。在 [62, 65], 中，这一能力通过计算生长率来体现，结果显示硅藻的生长率高于其他浮游植物类型。基于这一观察，Litchman等人 [47] 致力于建立营养盐竞争性吸收能力系数的模型，并估算了硅藻、颗石藻、甲藻和绿藻的这一系数。作者汇编了营养物摄取和营养盐依赖型生长参数数据库，并据此拟合了基于配额-Droop定律 [27] 以及米氏-莫诺德 [71]方程的模型参数。他们的分析表明，硅藻能够更有效地应对良好环境条件的恢复。

2.2 化学计量关系与雷德菲尔德比值

雷德菲尔德于1934年发现，海洋中的碳、氮和磷（C:N:P）比例几乎恒定，无论是在浮游植物生物量中，还是在溶解态营养物质中。对于硅藻，雷德菲尔德化学计量比通常表示为 $C:N:P = 106:16:1$ [13], ，但已知该比例可能波动至 C:N:P $= 163{:}22{:}1$ [50, 43]。这些数值应理解为平均值，且局部差异可能很大。尤其是，细胞内化学计量比会因营养限制而发生显著变化 [59]。

化学计量失衡会造成许多后果。藻类生长速率可能受到影响，并会诱发异常分泌物，正如 [29]: “当营养元素 *X* 相对于需求过量时，消费者会提高该元素的特定损失速率（通过排泄或排遗）”所述。因此，正如 [51], ”*[...]* 所指出的，黏液质的形成是对自然腐殖化过程的一种改变，这种改变发生在有机质降解阶段慢于合成阶段时。这种改变可以 *[...]* 促进难降解物质的形成，例如大型聚集体和黏液质。”因此，随着磷限制阻止

细胞分裂，化学计量失衡可能会阻碍负责降解这种有机物（黏液）的细菌生长。其结果可能是 liga 的形成。

2.2.1 氮磷失衡

[67] 指出，在磷限制的情况下，氮相对于磷酸盐过量可能是触发 liga 生成的因素。在亚得里亚海的黏液现象中， [17], 也提到了氮的主导影响；塔斯曼湾的情况亦是如此， [48], 在那里观察到了类似的失衡，但将其解释为 TEP 产生的结果而非原因。

当氮含量相较于磷较高时，人们关注的是富含氮而非磷的聚合物分泌物，而 TEP 的含氮量较低。同时，CSP[2] 是富氮的胞外聚合物颗粒，近期在 [69]中受到研究：作者指出，CSP 的碳氮比为 3.8:1（低于 6.6:1 的雷德菲尔德比值），而 TEP 的碳氮比估计可达 26:1。

如果将 CSP 理解为过量氮的排泄，那么 [49] 指出，与 TEP 不同，CSP 似乎不会显著影响聚集过程，也可能不会像 TEP 那样在碳循环中发挥关键作用。总之，导致 liga 形成的异常 TEP 分泌，或许应从磷限制以及碳磷或碳氮失衡的背景中寻找。

2.2.2 失衡 C：Por C:N

从地质学角度来看，海洋硅藻一直处于调节大气二氧化碳分压（pCO_2）的前沿，尤其是通过降低大气二氧化碳含量来实现这一点 [20]。富含硅藻的沉积物可追溯至晚白垩世。较近时期的富含硅藻的湖泊沉积物则形成于始新世，而大型沉积层见于中新世 [73]。Harwood 等 [37] 将浮游硅藻物种的出现定在早白垩世（阿尔布阶）末期，将海洋硅藻的灭绝定在晚白垩世（塞诺曼阶／土仑阶）早期，并将远洋硅藻沉积的开端定在坎潘阶早期。然而，这些年代可能更早 [36, 53] ，且可能与这些时期可识别的局部二氧化碳分压峰值有关 [8]。此后，新生代期间硅藻种群的生长有所下降 [56] ，同时大气二氧化碳分压总体降低，但受到局部峰值的扰动 [10]。

由于大量人为排放的 CO_2 进入大气，海洋吸收了大量无机碳，使碳氮化学计量比上升。这对各种海洋生物过程和生物地球化学过程都有影响，也凸显了海洋中由生物驱动的反馈对全球气候变化的重要性。 [58] 指出，对于相同的无机营养盐吸收量，随着 CO_2 分压升高，有机物的产生量会显著增加，可能以透明胞外聚合物颗粒（TEP）的形式存在。

许多作者指出，由硅藻和蓝细菌占主导的浮游生物群落所产生的透明胞外聚合物颗粒（TEP）与 CO_2 浓度之间存在很强的相关性 [7, 11, 23, 38, 39, 40, 49, 62,70, 72]，但对于这些分泌物的作用有不同解读：排出过量物质以重新平衡雷德菲尔德化学计量关系、控制浮力、驱避摄食者，或吸引负责黏液降解的细菌。

根据理论上的雷德菲尔德比值 C:N:P=106:16:1，这与以下内容密切相关：

[2]含碳多糖：考马斯亮蓝可染颗粒

浮游植物生物量的生成方程：

$$106\,CO_2 + 122\,H_2O + 16\,HNO_3 + H_3PO_4 \longrightarrow (CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 138\,O_2$$

而不特别与雷德菲尔德比值相关的 TEP 产生方程为[3]

$$106\,CO_2 + 105\,H_2O \longrightarrow C_{106}\,H_{201}O_{105} + 106\,O_2.$$

C:P 或 C:N 失衡可能会促使硅藻产生 TEP，以重新平衡其雷德菲尔德比值。在 [49] 中观察到了这一现象：在最佳生长条件下，pCO_2 升高会使硅藻 中肋骨条藻 的 TEP 产生增加。

当然，实际情况更为复杂。具体而言，这取决于物种；在 [49] 中，针对硅藻 海链藻 进行的同一项实验并未发现 TEP 产生发生变化（不过，在非最优辐照度和生长温度下，TEP 产生有所增加）。TEP 产生的变化还可能由其他因素引起：营养限制（细胞碳溢出）和温度（温度升高可增强胞外释放），参见 [49]。

3 模型陈述

海洋生态系统模型需要考虑大量变量，例如不同类型的浮游植物和摄食者、营养盐、环境条件或光合作用模型。这类模型旨在描述相当长时间尺度上的生物多样性。关于浮游生物生态学中的此类经典模型，参见例如 ˙。˙ [28, 32, 18] 和 [31] ；不过，这些模型并未对黏液生成进行建模。

我们的目标是提出一个数学模型，用于描述水华期间浮游植物种群的演化及相应的 TEP 产生演化。当 TEP 浓度达到预设阈值时，即认为 liga 的第一阶段（如引言部分所述）已经形成。远洋生态系统极其复杂，因此我们只保留对 liga 生成过程的理解中最关键的特征，这必然会对现实作出大幅简化。根据前文所述，我们认为硅藻浮游植物物种是 TEP 产生的源头；种群发生水华且受到磷限制时，碳氮化学计量比会失衡，进而促使 TEP 产生。我们将忽略捕食：预计在硅藻水华期间，捕食者会延迟生长（硅藻在生长方面的生态优势详见第 2.1 节）。更普遍地说，我们再次强调，建模的目标是描述导致 liga 生成的第一阶段，而非研究 liga 所在的整个生态系统。

浮游植物种群模型传统上以配额为基础。基本工具包括：用于营养盐吸收的米氏–门特–莫诺德规则（见 [71]），以及用于描述配额和限制对浮游植物生长影响的德鲁普–李比希定律（见 [27]）。

我们简要回顾一下这些概念。对于浓度为 D 的某一物种，以及浓度为 N的某种营养盐，其对应的配额 定义为 $Q = \frac{N}{D}$。
配额-Droop定律通过 $\mu_\infty\left(1 - \frac{Q_{\min}}{Q}\right) - m$ 描述净生长率（其中 $\underline{Q}_{\min}$ 是最小配额， μ_∞ 是物种在配额无限大时的生长率， m 是死亡率）。米氏-门诺方程通过 $V_{\max}\frac{N}{K+N}$ 定义营养物摄取率（其中 $V_{\max}$是最大营养盐吸收速率， K 是营养物摄取的半饱和常数）。 ——

[3]在其化学书写得到认可的情况下

3.1 对若干数学模型的讨论

本节介绍文献中发现的若干浮游生物模型。我们并不打算面面俱到，而是希望探讨如何调整这些模型，使其朝着LIGA建模的方向发展。

在 [45], 中，提出了一种依赖多种营养盐的浮游植物生长模型，其中纳入了营养盐限制和化学计量信息。在 [5] 中，类似的模型被置于一个更复杂的情境中，其中涉及扩散/对流、光照、沉降速率和捕食者。

[45] 中的数学模型已与 [45]中恒化器[4]实验的实验数据进行了比较。作者得出结论：其结果总体较为令人满意，但在高营养盐水平下指数增长期间，浮游植物的化学计量关系除外。造成这一情况有两个原因。首先，模型没有描述胞外分泌过程，而这一过程可以排出过量营养盐。其次，在配额平衡方程中，除细胞分裂外，没有纳入生长所消耗配额的负项。

在 [55], 中，提出了一个捕食者—猎物模型，其中包含一种藻类、一种牧食者物种以及过量供应的一种营养盐。模型加入了未用于生长的已摄取营养盐的排放，这与 [5], 中的做法相同，并考虑生产者生物量对营养盐浓度的反馈。与此同时，模型没有考虑细胞分裂导致的配额减少。已摄取营养盐的过量部分是否能像 [5, 55]所提出的那样重新成为可利用营养盐，这一点并不明确。以碳为例：浮游植物摄取无机碳后，经光合作用将其转化为多糖，因而无法再以无机碳的形式分泌回胞外介质，供其再次摄取。另一方面，鉴于前文在第 2.2 节讨论的化学计量失衡的重要性，模型似乎有必要纳入某种营养盐过量时的分泌过程，尤其是在另一种营养盐受限时。这无疑有助于解释 [44]中指数增长期间浮游植物化学计量关系方面的问题。

因此，模型似乎有必要增加一个或多个变量，以对应营养盐过剩时胞外聚合物质（胞外聚合物质）的分泌：碳过剩时对应透明胞外聚合物颗粒，氮和碳过剩时对应含碳多糖。

3.2 双营养盐模型

考虑一个恒化器实验，其流入/流出冲刷速率为 $a > 0$。硅藻浓度（本例中的生物量生产者）记为 D。考虑两种营养盐：氮和碳；它们在胞外介质中的相应浓度分别为 N 和 C，在浮游植物中的浓度分别为 P_N 和 P_C。相应的配额为 $Q_N = \frac{P_N}{D}$, $Q_C = \frac{P_C}{D}$，而 M 表示胞外聚合物质浓度。

设恒化器入口的氮浓度为 N_{in}，流入/流出氮平衡为 $a(N_{\text{in}} - N)$。硅藻的氮摄取速率记为 τ_N；在恒化器中不存在其他物种的情况下，营养盐 N 的演化定律为，

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = a(N_{\text{in}} - N) - \tau_N D$$

同理，对于 C,

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = a(C_{\text{in}} - C) - \tau_C D$$

记 σ_N 为硅藻对 N 的消耗率（例如 生长所需），记 m_D 为硅藻的死亡率，则硅藻中 N 的浓度由下式决定

$$\frac{\mathrm{d}P_N}{\mathrm{d}t} = (\tau_N - \sigma_N)D - (a + m_D)P_N,$$

[4]化学 ostat：一种用于培养微生物、并可控制化学组成的系统 .

对于 C，情况也类似，

$$\frac{\mathrm{d}P_C}{\mathrm{d}t} = (\tau_C - \sigma_C)D - (a + m_D)P_C.$$

硅藻中的浓度为：

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t} = \tau_D D - (a + m_D)D,$$

其中 τ_D 是　　硅藻种群的生长率。最后，黏液浓度满足：

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} = \tau_M D - aM,$$

其中 τ_M 是胞外聚合物质的分泌率。
用配额表示，对其定义求导$\mathrm{d}Q_N\mathrm{d}t = \frac{1}{D}\,\mathrm{d}P_N\mathrm{d}t - \frac{P_N}{D^2}\,\mathrm{d}D\,\mathrm{d}t$，——　　——

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}Q_N}{\mathrm{d}t} =& \tau_N - \sigma_N - Q_N\tau_D,\\ \frac{\mathrm{d}Q_C}{\mathrm{d}t} =& \tau_C - \sigma_C - Q_C\tau_D,\end{aligned}$$

摄取　　摄取速率由第 3.1 节介绍的米氏-蒙诺定律给出，

$$\tau_N = \tau_N(t, N) = V^N_{\max}(t)\frac{N}{K_N(t) + N}, \tag{1}$$

$$\tau_C = \tau_C(t, C) = V^C_{\max}(t)\frac{C}{K_C(t) + C}. \tag{2}$$

下文中，　x^+ 表示实数 x的正部：　$x^+ = \max(0, x)$。只有当每种营养物质的配额均高于阈值时，细胞分裂才会发生：　$Q_C \geq Q^C_{\min} > 0$且 $Q_N \geq Q^N_{\min} > 0$。然后，根据 [45], Droop 生长函数并结合李比希定律，可得

$$\tau_D = \tau_D(t, Q_C, Q_N) = \mu_D(t)\min\left((1 - \frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+,\ (1 - \frac{Q^N_{\min}}{Q_N})^+\right) \tag{3}$$

其中，　μ_D 表示配额趋于无穷大时的最大分裂速率。在正常条件下，硅藻化学计量比 $C : N$ 为一个正数常量，记作 α：硅藻每利用 α 单位的 C ，就会利用 N单位的另一种物质。考虑到胞外聚合物质的释放取决于相对于N而言额外 C 的存在，也就是说，当 $Q_C > \alpha Q_N$ 且当然当 $Q_C > Q^C_{\min}$时，胞外聚合物质的释放速率 τ_M 将建模为：

$$\tau_M = \tau_M(t, Q_C, Q_N) = \mu_M(t)\min\left((1 - \frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+,\ (1 - \frac{\alpha Q_N}{Q_C})^+\right), \tag{4}$$

其中，　μ_M 为硅藻释放黏液的最大速率。

关于营养物质消耗，

$$\sigma_N = \sigma_N(t, Q_C, Q_N) = \Theta_D(t)\min\left((1 - \frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+,\ (1 - \frac{Q^N_{\min}}{Q_N})^+\right), \tag{5}$$

其中Θ_D 表示硅藻在配额无限大时用于生长的最大消耗率。
硅藻种群生长的生物量生产遵循化学计量关系：每单位 N对应 α 单位C ，因此碳消耗速率分为两部分，一部分用于硅藻生长，另一部分用于黏液生成，

$$\sigma_C = \alpha\,\sigma_N + \sigma_M$$

其中,

$$\sigma_M = \sigma_M(t, Q_C, Q_N) = \Theta_M(t) \min\left((1 - \frac{Q_{\min}^C}{Q_C})^+,\ (1 - \frac{\alpha Q_N}{Q_C})^+\right), \tag{6}$$

其中 Θ_M 是硅藻对黏液的最大消耗率。

简而言之，我们得到如下系统:

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = F(t, X), \tag{S}$$

其中，模型变量汇集于列向量 $X = (N,\ C,\ Q_N,\ Q_C,\ D,\ M)^T$，函数 F 概括如下,

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} &= a(N_{\mathrm{in}}(t) - N) - \tau_N(t, N)D \ :=\ F_1(t, X),\\
\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} &= a(C_{\mathrm{in}}(t) - C) - \tau_C(t, C)D \ :=\ F_2(t, X),\\
\frac{\mathrm{d}Q_N}{\mathrm{d}t} &= \tau_N(t, N) - \sigma_N(t, Q_C, Q_N) - \tau_D(t, Q_C, Q_N)Q_N \ :=\ F_3(t, X),\\
\frac{\mathrm{d}Q_C}{\mathrm{d}t} &= \tau_C(t, C) - \alpha\,\sigma_N(t, Q_C, Q_N) - \sigma_M(t, Q_C, Q_N) - \tau_D(t, Q_C, Q_N)Q_C \ :=\ F_4(t, X),\\
\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t} &= \tau_D(t, Q_C, Q_N)D - (a + m_D(t))D \ :=\ F_5(t, X),\\
\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} &= \tau_M(t, Q_C, Q_N)D - aM \ :=\ F_6(t, X).
\end{aligned}$$

函数 τ_N、τ_C、 τ_D、 τ_M、 σ_N和 σ_C（分别由（1）至（6）给出）取决于 $K_N(t)$、$K_C(t)$、 $V^N{}_{\max}(t)$、 $V^C{}_{\max}(t)$、 $\mu_D(t)$、 $\mu_M(t)$、 $\Theta_D(t)$和 $\Theta_M(t)$。这些参数原则上取决于时间 t （因为它们是光照强度和温度的函数，参见例如 [24]），不过在数值实验中会将它们设为常数。对 $N_{\mathrm{in}}(t)$、 $C_{\mathrm{in}}(t)$和 $m_D(t)$也有同样的说明。最后，模型还取决于常参数 a、 $Q_{\min}^N$、 $Q_{\min}^C$ 和 α。

4 数学模型分析

出于技术原因，同时也完全符合生物建模，对系统 (S) 的参数作出以下假设,

$$\exists \mathcal{M} > 0, \quad a, Q_{\min}^C, Q_{\min}^N, \alpha \in (\frac{1}{\mathcal{M}}, \mathcal{M}), \quad m_D \in C\Big([0, +\infty), (0, \mathcal{M})\Big), \tag{7}$$

$$N_{\mathrm{in}}, C_{\mathrm{in}}, V_{\max}^N, K_N, V_{\max}^C, K_C, \mu_D, \mu_M, \Theta_D, \Theta_M \in C\Big([0, +\infty), (\frac{1}{\mathcal{M}}, \mathcal{M})\Big). \tag{8}$$

与其他参数函数相反，允许死亡率 m_D 取零，这与当前恒化器型实验的背景相关。

下面明确问题的解所指的含义。

定义 1. 系统 (S) 的一个解是任意具有非负值的绝对连续函数 X ，它满足常微分方程 $\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = F(t, X)$，并与初始条件 $X(0) = X_0$ 相关，其中 $X_0 \geq 0$。—

为方便起见，对于 $X \in \mathbb{R}^6$， $X \geq 0$ 表示对于 $1 \leq i \leq 6$，有 $X_i \geq 0$ 。

我们的主要结果如下。

定理1。 在假设（7）和（8）下,

1. 根据定义，系统 (S) 存在唯一的极大解 $1,$

2. 该唯一解是一个全局解（定义于 $t \in |0,+\infty)$),

3. 如果存在时间 $t_0 \geq 0$，使得 $X_3(t_0) = Q_N(t_0) \geq Q^N_{\min}$，那么对于任意 $t \geq t_0$， $Q_N(t) \geq Q^N_{\min}$。同样，如果 $X_4(t_0) = Q_C(t_0) \geq Q^C_{\min}$，那么对于任意 $t \geq t_0$， $Q_C(t) \geq Q^C_{\min}$（换言之，该解始终与生物学相关）。

此外，在常参数的情况下，关于参数的以下正则性成立。记

$$A = (a, N_{\text{in}}, C_{\text{in}}, V^N_{\max}, K_N, V^C_{\max}, K_C, Q^C_{\min}, Q^N_{\min}, \alpha, \mu_D, \mu_M, \Theta_D, \Theta_M, m_D),$$

$\mathcal{A} = (\ ^1_{\mathcal{M}}, \mathcal{M})^{15}$中的常参数向量。考虑问题 (9) 的给定初始条件 $X_0 \geq 0$。

4. 对于任意 $T > 0$，唯一解 $\underline{X}(t, A)$ 关于时间变量 $t \in [0, T]$和参数 $A \in \mathcal{A}$ 是弱可微的，

$$X \in W^{1,\infty}\left((0,T) \times \mathcal{A}\right)^6,$$

且 $t \mapsto X(t, \ \cdot) \in C^0(\overline{\mathcal{A}})^6$ 关于 t 连续可微，

$$X \in C^1([0,T], C^0(\overline{\mathcal{A}})^6),$$

and,

$$X \in \mathrm{Lip}([0,T], W^{1,\infty}(\mathcal{A})^6).$$

$\nabla_A X$ 是通过对系统 (S) 关于 A 求导得到的线性常微分方程的唯一解，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\nabla_A X(t,A) = \frac{\partial F}{\partial X}\big(X(t,A), A\big)\nabla_A X(t,A) \ + \ \frac{\partial F}{\partial A}\big(X(t,A), A\big),$$

其初始条件为 $(\nabla_A X)_0 = 0$。

定理1的证明分为引理 2、3 和 4（对应第1和第2点）以及引理5（对应第3点）。随后，第4点在引理7、8和9中作了详细阐述。

最后，在第5节中，将运用定理1中陈述的可微性性质，提出一种基于高斯-牛顿法的模型(9)参数辨识方法：

- 讨论一组现实的参数选择，并通过展示模型动力学的直接模拟加以说明，
- 然后，提出一种数值方法，用于识别问题参数，并由数值统计结果提供支持。

4.1 适定性

为研究系统 (S) 的解的正性问题，我们考察柯西问题，

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = F(t, X^+), \quad X(0) = X_0. \tag{9}$$

本节将证明，对于所有 $t \geq 0$，问题 (9) 都是适定的，并具有全局解。此外，当 $X_0 \geq 0$ 时，其解将满足 $X(t) \geq 0$，因此将与系统 (S) 的解一致。

在接下来的 中，我们通常用 $C > 0$ 表示一个仅取决于

参数 $\mathcal{M}$ 的正数常量，假设条件为（7）（8），但其值可能因情况而异。

注意，对于正的 $Q^C_{\min}$ 和 $Q^N_{\min}$，以及非负的 Q_C 和 Q_N，

$$\min\left((1-\frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+,\ (1-\frac{Q^N_{\min}}{Q_N})^+\right)=\min\left(1-\frac{Q^C_{\min}}{\max(Q^C_{\min},Q_C)},\ 1-\frac{Q^N_{\min}}{\max(Q^N_{\min},Q_N)}\right),$$

并且注意到，对于任意 $0\le Q_C\le Q^C_{\min}$，$(1-\frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+=0$，可得

$$\min\left((1-\frac{Q^C_{\min}}{Q_C})^+,\ (1-\frac{\alpha Q_N}{Q_C})^+\right)=\min\left(1-\frac{Q^C_{\min}}{\max(Q^C_{\min},Q_C)},\ 1-\frac{\alpha Q_N}{\max(\alpha Q_N,Q_C)}\right),$$

约定若 $Q_N=Q_C=0$，则 $\alpha Q_N\max(\alpha Q_N,\ Q_C)=0$。那么，引入如下函数$\mathbb{A}$，其先验地 定义在任意 $(a,\ b,\ c,\ d)\in\mathbb{R}^4$ 上：

$$\mathbb{A}(a,b,c,d)=\min\left(1-\frac{a^+}{\max(a^+,b^+)},1-\frac{c^+}{\max(c^+,d^+)}\right)\ \text{ with convention }\ \frac{0}{0}=0,\qquad(10)$$

该函数用于研究问题 (9)，并满足以下引理。

引理 1。• 对于任意 $(a,\ b,\ c,\ d)\in\mathbb{R}^4$，$0\le\mathbb{A}(a,\ b,\ c,\ d)\le 1$。

• 令 $\delta>0$，$(a_i,\ b_i,\ c_i,\ d_i)\in\mathbb{R}^4$ 满足 $a_i,\ c_i\ge\delta,\ i=1,\ 2$，则，

$$\left|\mathbb{A}(a_1,b_1,c_1,d_1)-\mathbb{A}(a_2,b_2,c_2,d_2)\right|\le 2\frac{|a_1-a_2|+|c_1-c_2|}{\delta}+\frac{|b_1-b_2|+|d_1-d_2|}{\delta}.$$

• 令 $\delta>0$、$(a_i,\ b_i,\ c_i)\in\mathbb{R}^4$ 满足 $a_i\ge\delta$, $i=1,\ 2$，则

$$\left|\mathbb{A}(a_1,b_1,c_1,b_1)-\mathbb{A}(a_2,b_2,c_2,b_2)\right|\le 2\frac{|a_1-a_2|+|c_1-c_2|+|b_1-b_2|}{\delta}.$$

证明。考虑 $(a_i,\ b_i,\ c_i,\ d_i)\in[\delta,+\infty[\times\mathbb{R}^+\times[\delta,+\infty[\times\mathbb{R}^+$，其中给定一个正的 δ, $i=1$ 和 2。利用最小值和最大值函数的以下不等式，$|\min(x,\ y)-\min(a,\ b)|\le|x-a|+|y-b|$ 以及 $|\max(x,\ y)-\max(a,\ b)|\le|x-a|+|y-b|$，可得

$$\begin{aligned}
&\left|\mathbb{A}(a_1,b_1,c_1,d_1)-\mathbb{A}(a_2,b_2,c_2,d_2)\right|\\
=&\left|\min\left(1-\frac{a_1}{\max(a_1,b_1)},1-\frac{c_1}{\max(c_1,d_1)}\right)-\min\left(1-\frac{a_2}{\max(a_2,b_2)},1-\frac{c_2}{\max(c_2,d_2)}\right)\right|\\
\le&\left|\frac{a_1}{\max(a_1,b_1)}-\frac{a_2}{\max(a_2,b_2)}\right|+\left|\frac{c_1}{\max(c_1,d_1)}-\frac{c_2}{\max(c_2,d_2)}\right|\\
\le&\left|\frac{(a_1-a_2)\max(a_2,b_2)+a_2[\max(a_2,b_2)-\max(a_1,b_1)]}{\max(a_1,b_1)\max(a_2,b_2)}\right|+\left|\frac{c_1}{\max(c_1,d_1)}-\frac{c_2}{\max(c_2,d_2)}\right|\\
\le&\frac{|a_1-a_2|}{\max(a_1,b_1)}+\frac{|\max(a_2,b_2)-\max(a_1,b_1)|}{\max(a_1,b_1)}+\frac{|c_1-c_2|}{\max(c_1,d_1)}+\frac{|\max(c_2,d_2)-\max(c_1,d_1)|}{\max(c_1,d_1)}\\
\le&\frac{2}{\delta}\Big[|a_1-a_2|+|c_1-c_2|\Big]+\frac{1}{\delta}\Big[|b_1-b_2|+|d_1-d_2|\Big].
\end{aligned}$$

对于带符号变量，该不等式在右侧为 $a_i^+,\ b_i^+,\ c_i^+,\ d_i^+$(i=1,2) 时仍成立；结果成立是因为对于任意实数 $x,\ y,\ |x^+-y^+|\le|x-y|$。

现在考虑第二个不等式，先讨论非负变量的情形。这里假设$a_i\ge\delta$。在 $b_i>a_i$的特殊情况下，有 $b_1,\ b_2\ge\delta$，因此第二个不等式由第一个不等式推出。现在，如果 $b_i\le a_i$，那么 $\mathbb{A}(a_i,\ b_i,\ c_i,\ b_i)=0$，因此我们只需考察 $b_1\le a_1$ 且 $b_2>a_2$ 的情形（第四种情形类似），

$$\left|\mathbb{A}(a_1,b_1,c_1,b_1)-\mathbb{A}(a_2,b_2,c_2,b_2)\right|=\mathbb{A}(a_2,b_2,c_2,b_2)\le 1-\frac{a_2}{b_2},$$

并且，由于 $b_1 - a_1 \le 0$,

$$1 - \frac{a_2}{b_2} = \frac{b_2 - b_1 + (b_1 - a_1) + a_1 - a_2}{b_2} \le \frac{|b_2 - b_1| + |a_1 - a_2|}{\delta}.$$

带符号变量的情形与上述情况类似。 □

柯西问题 (9) 的适定性由以下引理陈述 a.

引理 2. 在假设 (7) 和 (8) 下，函数 $(t, X) \mapsto F(t, X^+)$ 连续，且关于其第二个变量 X 在 $[0, +\infty) \times \mathbb{R}^6$ 上局部 Lipschitz 连续。

因此，对任意初始条件 $X_0 \in \mathbb{R}^6$，Picard–Lindel¨of 定理给出了柯西问题 (9) 的极大解的存在性和唯一性结果。

证明。 此处记为 F_i^+: $(t, X) \mapsto F_i(t, X^+)$。

$$\begin{aligned} F_1(t, X_1^+) - F_1(t, X_2^+) &= aN_2^+ - aN_1^+ + \tau_N(t, N_2^+)D_2^+ - \tau_N(t, N_1^+)D_1^+ \\ &= a(N_2^+ - N_1^+) + D_2^+(\tau_N(t, N_2^+) - \tau_N(t, N_1^+)) \\ &\quad + \tau_N(t, N_1^+)(D_2^+ - D_1^+). \end{aligned}$$

根据假设 (7)，式 (1) 中的 $\tau_N(t, N^+)$ 有界，且关于 N 在 $[0, +\infty)\times[0, +\infty)$ 上全局 Lipschitz 连续，其常数仅取决于 $\mathcal{M}$。于是,

$$\left|F_1(t, X_1^+) - F_1(t, X_2^+)\right| \le C(1 + |D_2|)\left(|N_1 - N_2| + |D_1 - D_2|\right),$$

并且 F_1^+在 $[0, +\infty) \times \mathbb{R}^6$ 上关于 X 连续且局部 Lipschitz 连续，此外 F_2^+和 F_5^+也具有类似的证明。

现在考虑 F_3^+: $(t, X) \mapsto F_3(t, X^+)$，回顾一下，$F_3(t, X^+) = \tau_N(t, N^+) - \sigma_N(t, Q_C^+, Q_N^+) - \tau_D(t, Q_C^+, Q_N^+)Q_N^+$。我们刚才指出，第一项关于 N 是全局 Lipschitz 连续的。根据 $\mathbb{A}$ 的定义（10），可得,

$$\begin{aligned} \sigma_N(t, Q_C^+, Q_N^+) &= \Theta_D(t)\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N), \\ \tau_D(t, Q_C^+, Q_N^+) &= \mu_D(t)\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N). \end{aligned}$$

根据假设（8）， Θ_D和 μ_D有界；由引理 1 可得： $\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N) \le 1$并且,

$$\begin{aligned} &\left|\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_{C,1}, Q_{\min}^N, Q_{N,1}) - \mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_{C,2}, Q_{\min}^N, Q_{N,2})\right| \\ &\qquad \le C\left(|Q_{C,1} - Q_{C,2}| + |Q_{N,1} - Q_{N,2}|\right). \end{aligned}$$

由此可得,

$$|\sigma_N(t, Q_{C,1}, Q_{N,1}) - \sigma_N(t, (Q_{C,2}, Q_{N,2})| \le C\left(|Q_{C,1} - Q_{C,2}| + |Q_{N,1} - Q_{N,2}|\right),$$

and,

$$\begin{aligned} &\left|\tau_D(t, Q_{C,1}^+, Q_{N,1}^+)Q_{N,1}^+ - \tau_D(t, Q_{C,2}^+, Q_{N_2}^+)Q_{N,2}^+\right| \\ &\quad \le |\tau_D(t, Q_{C,1}^+, Q_{N,1}^+)|\,|Q_{N,1}^+ - Q_{N,2}^+| + \left|\tau_D(t, Q_{C,1}^+, Q_{N,1}^+) - \tau_D(t, Q_{C,2}^+, Q_{N_2}^+)\right|\,|Q_{N,1}^+| \\ &\quad \le C\,|Q_{N,1} - Q_{N,2}| + C\left(|Q_{C,1} - Q_{C,2}| + |Q_{N,1} - Q_{N,2}|\right)|Q_{N,1}|. \end{aligned}$$

综上，这证明了 F_3^+在 $[0, +\infty) \times \mathbb{R}^6$ 上关于 X 连续且局部 Lipschitz 连续。

现在考虑 F_4^+，我们回顾一下： $F_4^+(t, X) = g_4(t, X) - \sigma_M(t, Q_C^+, Q_N^+)$, 其中 $g_4(t, X^+) := \tau_C(t, C^+) - \alpha\sigma_N(t, Q_C^+, Q_N^+) - \tau_D(t, Q_C^+, Q_N^+)Q_C^+$。

根据前文的推导， g_4 关于 X 是局部 Lipschitz 连续的，接下来需要研究这一项，

$$\sigma_M(t, Q_C^+, Q_N^+) = \Theta_M(t)\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, \alpha Q_N^+, Q_C).$$

由于根据假设 (8)， Θ_M 有界，因此根据引理 1 的最后一点，后者关于 X 是 Lipschitz 连续的。因此， F_4^+在 X 上关于 $[0, +\infty) \times \mathbb{R}^6$连续且局部 Lipschitz 连续；类似地证明可得 F_6^+也如此。 □

现在我们来证明问题 (9) 的解具有正性：这意味着对于非负初始条件 X_0，表述 (S) 与 (9) 等价。

引理 3. 在假设 (7) 和 (8) 下，问题 (9) 对初始条件 $X_0 \geq 0$ 的唯一极大解 X 始终非负：只要该解存在，就有 $X(t) \geq 0$。这是按照定义 1 的意义，系统 (S) 的唯一解。

证明。 考虑问题 (9) 在 $X_0 \geq 0$下的一个解 X。我们来证明，对于其任意一个坐标 i， $X_i^-(t) = 0$，其中 $X_i^- = \max(0, -X_i)$ 是 X_i的负部。根据 Sobolev空间中的链式法则，$\mathrm{d}X_i^-\mathrm{d}t = -\mathrm{d}X_i\,\mathrm{d}t\ \mathbb{1}_{\{X_i \leq 0\}} = -F_i(\cdot, X^+)\ \mathbb{1}_{\{X_i \leq 0\}}$ 对几乎处处的时间 t成立。现在，关键在于注意到，在系统 (S) 中，若 $X_i \leq 0$，则 $F_i(\cdot, X^+) \geq 0$。由此可得$\frac{\mathrm{d}X_i^-}{\mathrm{d}t} \leq 0$；根据假设， $X_i(0)^- = 0$，因此 $X_i(t)^- = 0$。 □

现在我们研究问题 (9) 的解是否全局存在。

引理 4. 在假设 (7) 和 (8) 下，问题 (9) 的极大解是一个全局解。

证明。 $\mathbb{R}^n$ 上的欧几里得范数记为 $\|\cdot\|$。考虑问题 (S) 在初始条件 $X_0 \geq 0$下的一个解 $X(t)$:

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\|X(t)\|^2}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}X(t)}{\mathrm{d}t} \cdot X(t) = F(t, X(t)) \cdot X(t),$$

并且，根据符号论证（因为 $X(t) \geq 0$，结合引理 3），

$$\begin{aligned}
&F(t, X(t)) \cdot X(t) \leq aN_{\text{in}}N + aC_{\text{in}}C + V_{\max}^N \frac{NQ_N}{K_N + N} + V_{\max}^C \frac{CQ_C}{K_C + C} \\
&+ \mu_D \mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N)D^2 + \mu_M \mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, \alpha Q_N, Q_C)DM \\
\leq &a\|N_{\text{in}}\|_\infty^2 + aN^2 + a\|C_{\text{in}}\|_\infty^2 + aC^2 + \frac{\|V_{\max}^N\|_\infty}{\min_t K_N(t)}NQ_N + \frac{\|V_{\max}^C\|_\infty}{\min_t K_C(t)}CQ_C \\
&+ \|\mu_D\|_\infty D^2 + \|\mu_M\|_\infty DM \leq \frac{1}{2}C\left(1 + \|X(t)\|^2\right),
\end{aligned}$$

其中 C 是一个取决于假设 (7) (8) 中的 $\mathcal{M}$ 的常数。于是，由格朗沃尔引理可得，

$$|X(t)|^2 \leq e^{Ct}\left(|X_0|^2 + Ct\right). \tag{11}$$

假设极大解 $X(t)$ 不是全局解。因此，存在 $T > 0$ 使得 $\lim_{t \to T^-} ||X(t)|| = +\infty$，这与上述不等式矛盾。 □

4.2 生物学上相关的解

根据引理 3 和 4，对于非负初始条件，系统 (S) 存在唯一的非负全局解。这里指出，如果配额在初始时刻大于最小配额，那么此后也会保持大于最小配额；也就是说，生物学相关的初始条件对应生物学上相关的解。

引理5。 在假设 (7) 和 (8) 下，考虑初始条件为 $X_0 \geq 0$ 的问题 (S) 的解。

如果存在 t_0 使得 $Q_N(t_0) \geq Q_{\min}^N$，那么对于任意 $t \geq t_0$，$Q_N(t) \geq Q_{\min}^N$。类似地，如果存在 t_0 使得 $Q_C(t_0) \geq Q_{\min}^C$，那么对于任意 $t \geq t_0$，$Q_C(t) \geq Q_{\min}^C$。

注1. 注意

i) 若 $Q_N \leq Q_{\min}^N$ 属于 $(0,T)$，则 $Q_N(t) = Q_N(0) + \int_0^t V_{\max}^N(s)N(s)K_N(s) + N(s)\,\mathrm{d}s$ 若 $t \leq T$。ii) 若 $Q_C \leq Q_{\min}^C$ 属于 $(0,T)$，则 $Q_C(t) = Q_C(0) + \int_0^t V_{\max}^N(s)C(s)K_C(s) + C(s)\,\mathrm{d}s$ 若 $t \leq T$。iii) 若 $Q_N \leq Q_{\min}^N$ 或 $Q_C \leq Q_{\min}^C$ 属于 $(0,T)$，则 $D(t) = D(0)e^{-(a+m_D)t}$ 属于 $(0,T)$。因此，在存在 N 或 C 限制的情况下，只要这种情况持续，硅藻便无法继续分裂，硅藻种群会减少并趋于 0。

证明。证明过程与引理 3 类似。考虑 $X_3 = Q_N$ of $X(t)$ 的分量，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}(Q_N - Q_{\min}^N)^-}{\mathrm{d}t} = -1_{\{Q_N < Q_{\min}^N\}}\frac{\mathrm{d}Q_N}{\mathrm{d}t},\\
&= -1_{\{Q_N < Q_{\min}^N\}}\Big[V_{\max}^N(t)\frac{N}{K_N(t)+N} - [\Theta_D(t) + \mu_D(t)Q_N]\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N)\Big]\\
&= -1_{\{Q_N < Q_{\min}^N\}}V_{\max}^N(t)\frac{N}{K_N(t)+N} \leq 0.
\end{aligned}
$$

假设对于 $t_0 \geq 0$，$Q_N(t_0) \geq Q_{\min}^N$。由于 $(Q_N - Q_{\min}^N)^-$ 绝对连续，对上述不等式关于 $t \geq t_0$ 积分可得，

$$
(Q_N - Q_{\min}^N)^-(t) \leq (Q_N - Q_{\min}^N)^-(t_0) = 0,
$$

因此 $Q_N(t) \geq Q_{\min}^N$。类似地，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}(Q_C - Q_{\min}^C)^-}{\mathrm{d}t} = -1_{\{Q_C < Q_{\min}^C\}}\frac{\mathrm{d}Q_C}{\mathrm{d}t}\\
&= -1_{\{Q_C < Q_{\min}^C\}}\Big[V_{\max}^C(t)\frac{C}{K_C(t)+C} - [\alpha\Theta_D(t) + \mu_D(t)Q_C]\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, Q_{\min}^N, Q_N)\\
&\qquad\qquad - \Theta_M(t)\mathbb{A}(Q_{\min}^C, Q_C, \alpha Q_N^+, Q_C)\Big]\\
&= -1_{\{Q_C < Q_{\min}^C\}}V_{\max}^C(t)\frac{C}{K_C(t)+C} \leq 0,
\end{aligned}
$$

由此得到相同的结果。 □

4.3 关于参数的稳定性

本节讨论系统 (S) 的解关于其参数的稳定性。常参数的情形将在固定时间区间 $[0,T]$ 上进行研究。与定理1一样，参数集记为向量 $A \in \mathcal{A} = (\frac{1}{\mathcal{M}}, \mathcal{M})^{15}$,，其中 $\mathcal{M}$ 是假设 (7) (8) 中的上界，

$$
A = (a, N_{\text{in}}, C_{\text{in}}, V_{\max}^N, K_N, V_{\max}^C, K_C, Q_{\min}^C, Q_{\min}^N, \alpha, \mu_D, \mu_M, \Theta_D, \Theta_M, m_D) \in \mathcal{A}.
$$

在本节中，

- 一个初始条件 $X_0 \geq 0$ 和一个终止时间 $T > 0$ 固定，
- F: $(Y, A) \in \mathbb{R}^6 \times \mathcal{A} \mapsto F(Y, A) \in \mathbb{R}^6$ 表示定义系统 (S) 的函数，
- 对于任意 $t \in [0,T]$ 和 $A \in \mathcal{A}$，令 $X(t, A)$ 为柯西问题 $\mathrm{d}\,\mathrm{d}t^{Y=F}(Y, A)$ 的解在时间 t 时的值，该问题对应的初始条件为 $Y(0) = X_0$，

• 根据前一个引理，该函数定义良好， $X(t,\ A)\ \geq 0$ 并且根据不等式（11），存在一个仅取决于 T和 $\mathcal{M}$ 的常数 $\mathcal{K}>0$，使得 $0\leq X(t,\ A)\ \leq \mathcal{K}$,
• 接下来考虑函数 X： $[0,T]\times\mathcal{A}\to\mathbb{R}^6$ 并采用以下常用记号：$X(t,\ \cdot)$： $\mathcal{A}\ \to\ \mathbb{R}^6$ 是函数 $A\ \in\ \mathcal{A}\ \mapsto\ X(t,\ A)$，而 $X(\cdot,\ A)$: $[0,T]\ \to\ \mathbb{R}^6$ 是函数 $t\in[0,T]\mapsto X(t,\ A)$。

因此，系统 (S) 的函数 F可限制在 $(-\mathcal{K},\ \mathcal{K})^6\times\mathcal{A}$上；当需要紧集时，也可限制在其闭包 $[-\mathcal{K},\mathcal{K}]^6\times\overline{\mathcal{A}}$ 上。

引理 6. 存在 $\mathcal{L}\ >\ 0$，它仅取决于 T 和 $\mathcal{M}$，使得函数 F 在 $[-\mathcal{K},\mathcal{K}]^6\times\mathcal{A}$上是$\mathcal{L}$-Lipschitz 连续的。

证明. 引理 2 已证明， F 在 X上局部 Lipschitz 连续，因此它在紧集 $[-\mathcal{K},\mathcal{K}]^6\times\mathcal{A}$上关于 X 全局 Lipschitz 连续。下面证明它关于 A也全局 Lipschitz 连续：假设变量 X属于 $[-\mathcal{K},\mathcal{K}]^6$，并考虑两个参数 $A_1,\ A_2\in\mathcal{A}$。

式 (1) 中的函数 τ_N 满足，

$$\left|\tau_N(X,A_1)-\tau_N(X,A_2)\right|\leq\mathcal{K}\mathcal{M}|V^{N,1}_{\max}-V^{N,2}_{\max}|+\mathcal{M}^3\mathcal{K}|K^1_N-K^2_N|$$

将 N 替换为 C 后，式 (2) 中的 τ_C 也满足相同的不等式。因此， F_1 和 F_2 在 A 中全局 Lipschitz 连续。根据引理 1，式 (3) 中的函数 τ_D 满足，

$$\left|\tau_D(X,A_1)-\tau_D(X,A_2)\right|\leq|\mu^1_D-\mu^2_D|+2\mathcal{M}^2|Q^{C,1}_{\min}-Q^{C,2}_{\min}|+2\mathcal{M}^2|Q^{N,1}_{\min}-Q^{N,2}_{\min}|,$$

式 (5) 中的 σ_N 也满足类似的不等式，因此 F_3 和 F_5 在 A 中全局 Lipschitz 连续。再次利用引理 1，式 (4) 中的函数 τ_M 满足，

$$\left|\tau_M(X,A_1)-\tau_M(X,A_2)\right|\leq|\mu^1_M-\mu^2_M|+2\mathcal{M}^2|Q^{C,1}_{\min}-Q^{C,2}_{\min}|$$

式 (6) 中的 σ_M 也满足类似的不等式，因此 F_4 和 F_6 在 A 中全局 Lipschitz 连续，证明至此结束。 □

由此可直接得到以下第一个正则性结果。

引理 7. 设 $\mathcal{Q}=(0,T)\ \times\mathcal{A},\ X$ 和 $\partial_t X$ 是定义在 $\mathcal{Q}$ 上的有界 Lipschitz 连续函数，因此属于 $W^{1,\infty}(\mathcal{Q})^6$ [30, 定理 4.5]。
特别地，映射 $A\in\mathcal{A}\mapsto X(\cdot,\ A)\ \in[C^1([0,T])]^6$ 是 Lipschitz 连续的。

证明。 首先， X和 $\partial_t X$在 $[0,T]\times\mathcal{A}$上有界，

$$\|X(t,A)\|\leq\mathcal{K},\quad\|\partial_t X(t,A)\|\leq\|F\|_\infty,$$

那么，对于任意 $A,\ B\in\mathcal{A}$和 $s,\ t\in[0,T]$,

$$\|X(t,A)-X(s,A)\|\leq\int_s^t\|F(X(\tau,A),A)\|d\tau\leq\|F\|_\infty(t-s)$$

因此 X 在 t上是 Lipschitz 的。此外，根据引理 6

$$\|\partial_t X(t,A)-\partial_t X(s,A)\|=\|F(X(t,A),A)-F(X(s,A),A)\|\leq\mathcal{L}\|F\|_\infty(t-s),$$

并且 $\partial_t X$ 在 t 上也是 Lipschitz 连续的。现在我们证明， X 在 A 上也是 Lipschitz 连续的，

$$\begin{aligned}\|X(t,A)-X(t,B)\|&=\|\int_0^t F(X(s,A),A)-F(X(s,B),B)\,\mathrm{d}s\|\\&\leq\mathcal{L}\int_0^t\|X(s,A)-X(s,B)\|+\|A-B\|\,\mathrm{d}s,\end{aligned}$$

因此，对任意 $t \in [0,T]$，由 Gronwall引理可得，

$$\|X(t,A) - X(t,B)\| \le \mathcal{L}Te^{\mathcal{L}T}\|A-B\|.$$

这意味着 $\partial_t X$ 关于 t是 Lipschitz 的，

$$\begin{aligned}\|\partial_t X(t,A) - \partial_t X(t,B)\| &= \|F(X(t,A),A) - F(X(t,B),B)\| \\ &\le \mathcal{L}\Big[\|X(t,A)-X(t,B)\| + \|A-B\|\Big],\end{aligned}$$

至此证明完毕。 □

X 具有更高的正则性： $A \mapsto X(\cdot, A)$取值于 $C(\mathcal{A})$，并且关于 $[0,\overline{T}]$ 可微，具体如下。

引理8。 函数 X满足， $X \in C^1([0,T], C^0(\mathcal{A})^6) \cap \mathrm{Lip}([0,\overline{T}], W^{1,\infty}(\mathcal{A})^6)$。

证明。 根据前一个引理，对于任意 $p \in [1,+\infty)$， X， $\partial_t X \in L^\infty(0, T, W^{1,p}(\mathcal{A})^6)$。注意，由于 $L^\infty(\mathcal{A})$不可分， X （分别为 $\partial_t X$）作为从$(0, T)$到 $W^{1,\infty}(\mathcal{A})^6$ 的映射的可测性可能无法成立。

但是，对于任意有限的 p，都有 $X \in W^{1,\infty}(0, T, W^{1,p}(\mathcal{A})^6)$；并且，如果 $0 \le s < t \le T$，则有([12])：

$$\begin{aligned}\|X(t,\cdot) - X(s,\cdot)\|_{W^{1,p}(\mathcal{A})} &\le \int_s^t \|\partial_t X(\tau,\cdot)\|_{W^{1,p}(\mathcal{A})} d\tau \le (t-s)^{\frac{p-1}{p}} \|\partial_t X\|_{L^p(0,T,W^{1,p}(\mathcal{A}))} \\ &\le (t-s)^{\frac{p-1}{p}} \|\partial_t X\|_{W^{1,p}(\mathcal{Q})} \le (t-s)^{\frac{p-1}{p}} \|\partial_t X\|_{W^{1,\infty}(\mathcal{Q})} [19|\mathbb{A}|]^{\frac{1}{p}}\end{aligned}$$

由于 $X(t,\cdot)\ X(s,\cdot) \in W^{1,\infty}(\mathcal{A})^6, \lim_{p\to+\infty} \|X(t,\cdot)-X(s,\cdot)\|_{W^{1,p}(\mathcal{A})} = \|X(t,\cdot)-X(s,\cdot)\|_{W^{1,\infty}(\mathcal{A})}$，并取极限 $p \to +\infty$，得到

$$\|X(t,\cdot) - X(s,\cdot)\|_{W^{1,\infty}(\mathcal{A})} \le \|\partial_t X\|_{W^{1,\infty}(\mathcal{Q})}(t-s).$$

因此， X是一个从 $[0,T]$到 $W^{1,\infty}(\mathcal{A})$ 的有界 Lipschitz 连续函数 [6].
选取 p 使得 $W^{1,p}(\mathcal{A}) \hookrightarrow C^0(\mathcal{A})$，则对于任意 t， h 满足 t， $t+h \in [0,T]$，

$$\begin{aligned}&\Big\|\frac{X(t+h,.)-X(t,.)}{h} - \partial_t X(t,.)\Big\|_{C(\overline{\mathcal{A}})} = \frac{1}{|h|}\Big\|\int_t^{t+h} \partial_t X(\tau,.) - \partial_t X(t,.)\, d\tau\Big\|_{C(\overline{\mathcal{A}})} \\ \le &\frac{1}{|h|}\int_{(t,t+h)} \|\partial_t X(\tau,.) - \partial_t X(t,.)\|_{C(\overline{\mathcal{A}})}\, d\tau \le \mathcal{L}\|F\|_\infty h.\end{aligned}$$

因此， X作为一个取值于 $C(\mathcal{A})$ 的函数，在 $[0,T]$处可微，其导数为 $\partial_t X$，引理8中的结论成立。

□

现在我们关注函数 $X(t,A)$ 关于 A 的求导。由于 F 不是连续可微函数，因此不能应用隐函数定理，我们的论证将基于 Sobolev空间中的链式法则。为了继续，首先需要将 F 扩展为定义在 $\mathbb{R}^{6+15}$ 上的 Lipschitz 函数。这可以通过 Kirszbraun定理实现，但出于技术原因，我们将通过以下方式进行：将 A 在 F 中的每个坐标 x 替换为 $g(x) = \max(\frac{1}{\mathcal{M}}, \min(\mathcal{M}, x))$，并将 X 的每个坐标 x 替换为 $h(x) = \min(\mathcal{K}, x^+)$（或替换为这些函数的正则化形式）。这样，每个 $F_k (k = 1, ..., 6)$ 都是全局 Lipschitz 连续的分段 C^1 函数，其意义如 Murat等人 [52] 所述：“存在 $\mathbb{R}^{6+15}$ 的一个有限 Borel 分割 $(P^i)_{i\in I_k}$，以及定义在 $\mathbb{R}^{6+15}$ 上的同等数量的全局 Lipschitz 连续 C^1 函数$\widetilde{F}_k^i$，使得在 P^i 中有 $\widetilde{F}_k^i = F_k$。”

因此，由 [52, 定理 2.1],，由于 $X \in W^{1,p}(\mathcal{Q})^6$ 对任意有限的 p 均成立，可得 $F_k(X, \cdot) \in W^{1,p}(\mathcal{Q})$，根据链式法则：几乎处处在 $\mathcal{Q}$ 中，

$$\nabla_{(t,A)} F_k(X, \cdot) = \sum_{i \in I_k} 1_{P^i}(X)(DF_k)(X)\nabla_{(t,A)} X.$$

此外，$Y \in W^{1,p}(\mathcal{Q})^6 \mapsto F_k(Y, \cdot) \in W^{1,p}(\mathcal{Q})$ 对弱收敛是序列连续的，对强拓扑是连续的。

由于等式 $\partial_t X(t, A) = F\big(X(t, A)\ A\big)$ 在 $W^{1,p}(\mathcal{Q})$ 中成立，因此可得

$$\begin{aligned}\partial_t \nabla_A X(t,A) &= \nabla_A \partial_t X(t,A) = \nabla_A F\big(X(t,A), A\big) \\ &= \Big(\sum_{i \in I_k} 1_{P^i}\big(X(t,A)\big)(DF_k)\big(X(t,A), A\big)\nabla_A X(t,A)\Big)_k\end{aligned}$$

先验地 在 $L^p(\mathcal{Q})^{6\times 15}$ 中，因为 ∇ 是从 $W^{1,p}(\mathcal{Q})^{6\times 15}$ 到 $L^p(\mathcal{Q})^{6\times 15}$ 的连续线性映射，所以根据链式法则给出的上述正则性，也在 $W^{1,p}(\mathcal{Q})^{6\times 15}$ 中成立。
对于任意 $Z \in (a, N_{\text{in}}, C_{\text{in}}, V^N{}_{\text{最大}}\ K_N, V^C{}_{\text{最大}}\ K_C, Q^C_{\min}, Q^N_{\min}, \alpha, \mu_D, \mu_M, \Theta_D, \Theta_M, m_D)$,

$$\partial_Z F_k\big(X(t,A), A\big) = \mathbb{G}_{k,Z}\big(X(t,A), A\big) + \mathbb{H}_k\big(X(t,A), A\big)\partial_Z X(t,A)$$

其中 $\mathbb{G}_k = (\mathbb{G}_{k,\ a},\ \cdots,\ \mathbb{G}_{k,\ \Theta_M})^T$ 表示 $D_A F_k$，而 $\mathbb{H}_k$ 表示 $D_X F_k$ 是有界的博雷尔函数。

因此，回到演化问题，

$$\begin{aligned}\partial_t \nabla_A X(t,A) &= \Big(\mathbb{G}_k\big(X(t,A), A\big) + \mathbb{H}_k\big(X(t,A), A\big)\nabla_A X(t,A)\Big)_k \\ &= D_A F\big(X(t,A), A\big) + D_X F\big(X(t,A), A\big)\nabla_A X(t,A) \qquad (12)\end{aligned}$$

该常微分方程是可解的（[22,时变向量场的 Caratheodory 条件]）。最后说明，由于我们的研究仅限于初始条件为常数 X_0 的情形，上述常微分方程的初始条件为 $\nabla_A X(0, A) = 0$，由此得到以下引理。

引理 9. $\nabla_A X(\cdot, A)$ 是 $[0, T]$ 中满足与初始条件 $(\nabla_A X)_0 = 0$ 相关的线性常微分方程 (12) 的唯一绝对连续函数。

5 数值模拟：一个逆问题

本节旨在探讨如何利用恒化器实验获得的数据确定系统 (S) 的参数（假定为常数）。目前尚无此类数据，因此我们将采用一个目标模型，并通过数值实验衡量恢复目标模型参数的能力。为此，我们通过数值求解系统 (S)，并以给定的采样率记录其变量状态，从而构造虚拟恒化器数据。

我们已尽可能致力于构建一个现实且具有生物学相关性的目标问题，其中涉及 TEP 产生。迄今为止，对于给定的硅藻物种，还无法在文献中找到系统 (S) 的一组参数：某些参数对于特定物种是已知的（通常处于给定范围内），其他参数则可以间接估算。相关细节见第5节；变量单位以及参数的单位和值分别列于表1和表2中。

参数辨识算法及其数值评估将在第5.2节中介绍。

表 1：系统 (S) 的变量单位（Xeq. 表示黄原胶当量，这是表示 TEP 浓度的一种标准）。

变量	描述	unit
C	碳营养物浓度	μmol/L
N	氮营养盐浓度	μmol/L
Q_C	细胞碳配额	$10^{-9}\mu$mol/cell
Q_N	细胞氮配额	$10^{-9}\mu$mol/cell
D	硅藻浓度	10^9 细胞/L
M	TEP 浓度	g X当量/L

5.1 目标问题

本节介绍一个用于参数辨识的目标问题，其中包含物理变量单位，且参数与生物测量结果一致。问题 (S) 所采用的变量单位见表 1，参数见表 2。

5.1.1 参数定义

模型（S）的参数估计并不明显：文献中已找到若干参数（后文将给出详细信息和准确参考文献），但参数值因物种而异，有时还取决于条件和作者。对于某一硅藻物种，目前尚无一套全局参数，因此我们将重点放在数量级的搜索上：除非另有明确说明，参数均设定为取值范围内的中间值。此外，文献中无法找到某些特定参数，因此将考虑自行估计。

表 2：系统 (S) 的参数

变量	描述	值	unit
a	恒化器稀释率	0.59	天$^{-1}$
C_{in}	输入 C 浓度	2000	μmol/L
N_{in}	输入 N 浓度	15	μmol/L
$V_{\max}^{C}$	最大 C 摄取速率	400	10^{-9} μmol/细胞/天
$V_{\max}^{N}$	最大 N 摄取速率	70	10^{-9} μ摩尔/细胞/天
K_C	C 摄取半饱和常数	1.5	μ摩尔/升
K_N	N 摄取半饱和常数	1.25	μ摩尔/升
m_D	硅藻死亡率	0.1	天$^{-1}$
$Q_{\min}^{C}$	最小 C 细胞配额	0.5	10^{-9} μ摩尔/细胞
$Q_{\min}^{N}$	最小 N 细胞配额	10	10^{-9} μ摩尔/细胞
μ_D	硅藻最大生长率	1.24	天$^{-1}$
μ_M	TEP最大生成率	8.2	10^{-9} g Xeq./cell/day
Θ_D	硅藻生长的最大 N 消耗率	4.5	$10^{-9}\mu$ mol/cell/day
Θ_M	最大 C TEP 产生的消耗率	1000	$10^{-9}\mu$ 摩尔/细胞/天
α	$C:N$ 化学计量比	16	无单位

氮吸收。 硅藻从三种无机来源中吸收氮：铵、硝酸盐和亚硝酸盐。此处仅考虑硝酸盐吸收，因为它通常是氮的主要

来源，参见例如 [64]。为增强水华期间氮限制的影响，相对于 [43] 中给出的恒化器实验硝酸盐输入浓度范围 14-240 μmol/L，此处设定较低的 $N_{\text{in}} = 15$ μmol/L 值。 [41, 表 A46] 列出了不同海洋硅藻物种的硝酸盐吸收半饱和常数，范围为 0.45 至 1.87 μmol/L。 [41, 表 A60] 列出了不同硅藻物种的最大硝酸盐吸收速率，范围为 72 至 384 10^{-9} μmol/cell/day；为增强水华后硝酸盐限制的影响，此处设定较低的 $V^N_{\text{最大}} = 70$ 10^{-9} μmol/cell/day。 [43], 中使用的硝酸盐最小细胞配额为 $Q^N_{\min} = 45.4$ 10^{-9} μmol/cell，但该值过高，无法产生透明胞外聚合物颗粒，因此此处任意采用较小的 $Q^N_{\min} = 10$ 10^{-9} μmol/cell 值。

碳摄取。 碳营养物可以溶解态 CO_2 或 HCO_3^-的形式存在：溶解态 CO_2 的浓度较低且变化较大，在 5 至 25 μmol/L 之间，而 HCO_3^- 的浓度稳定得多且高得多，为 2000 μmol/L，因此我们将仅考虑以 HCO_3^- 作为碳源，其输入浓度为 C_{in}=2000 μmol/L。在 [15], 中，HCO_3^- 摄取的半饱和常数被评估为 1-2 μmol/L，硅藻 ***Thalassiossira Weissflogii*** 的最大 HCO_3^- 摄取速率为 175 - 230 μmol/(mg Chl_a)/h（Chl_a 代表 a 型叶绿素）。根据 [41, 表 A30]， *Tha-lassiossira* 物种的 Chl_a 细胞含量为 8.1 10^{-11} mg，由此可得 $V^C{}_{\max}$的范围为 340 至 450 10^{-9} μmol/细胞/天。文献中尚未找到碳 $Q^C_{\min}$ 的最小细胞配额。我们根据 [42] 提出了一种估算方法，其中报告称，只有在外部浓度较低时，硅藻才能积累无机碳（当外部浓度为 200 μmol/L 时，细胞内无机碳浓度为 400 μmol/L）；但当外部浓度处于正常状态，即为 2000 μmol/L 时，硅藻无法积累无机碳（此时细胞内无机碳浓度保持在 1470 μmol/L 以上）。假设细胞体积为 750 μm^3, ，见例如[21], ，这意味着 $Q^C_{\min} \geq 0.3\,10^{-9}\,\mu$mol/细胞以及 $Q^C_{\min} \leq 1.5\,10^{-9}\,\mu$mol/细胞。

其他参数。恒化器稀释率设为 a =0.59 天$^{-1}$，与 [43], 中的恒化器数值模拟一致；C:N 雷德菲尔德比为 $\alpha = 16$，死亡率设为 0.1 天$^{-1}$，这是 [41, 表 A72]中给出的浮游植物物种的通用值。硅藻***Thalassiossira Weissflogii*** 的最大生长率设为 $\mu_D = 1.24$ 天$^{-1}$，这是 [34],测得的；而 [33] 中的 TEP 产生恒化器实验显示，太平洋中一种海洋硅藻的最大 TEP 产生率为 $\mu_M = 8.2\ 10^{-9}$ g Xeq./细胞/天。
文献中无法找到剩余的两个参数 Θ_D 和 Θ_M。硅藻生长的最大硝酸盐消耗率 Θ_D 可根据硅藻最大生长率 $\mu_D = 1.24$ 天$^{-1}$估算。 [41, 表 A13] 报告了硅藻***Thalassiossira Weissflogii*** 的碳生物量，范围为 $250 - 450\ 10^{-9}\,\mu$mol C/细胞，因此硅藻生长的最大碳消耗率约为 $250 - 350 \times 0.24\ 10^{-9}\,\mu$mol C/细胞/天。采用硅藻生长的 C:N 雷德菲尔德比 $\alpha = 16$，我们提出估算值 $\Theta_D = 250 - 450 \times 0.24/16\ 10^{-9}\,\mu$mol N/细胞/天 = 3.75-6.75 $10^{-9}\,\mu$mol N/细胞/天。

最后，无法对 Θ_M 作出令人满意的估算，因此将其设定为 $\Theta_M = 1000\ 10^{-9}\mu$mol/cell/day，从而得到约为0.1 g X当量/L的最大透明胞外聚合物颗粒浓度，这与 [33]中的实验结果一致。

5.1.2 数值模拟

参数取表 2 中数值时，系统 (S) 的演化如图 2 和图 1 所示。系统 (S) 在 50 天的时间段内求解，并每隔一天记录一次解。在初始状态，恒化器中的营养盐浓度 $C(0)$ 和 $N(0)$ 设为 C_{in} 和 N_{in}，硅藻细胞配额 $Q_C(0)$ 和 $Q_N(0)$ 设为各自对应的最小配额 $Q^C_{\min}$和 $Q^N_{\min}$，

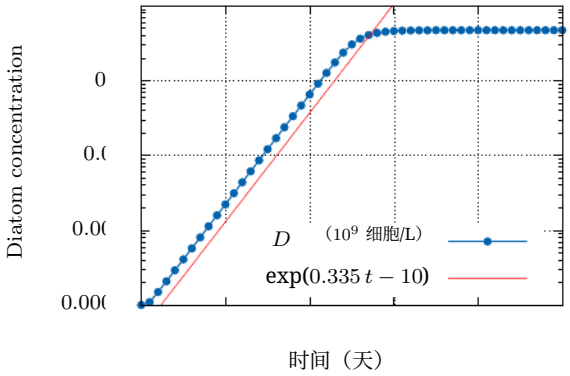

图1：硅藻种群的演化（对数刻度）

初始硅藻浓度为 $D(0) = 10^5$ cell/L（约为水华后观测到的硅藻种群的 1/500），且恒化器中初始时不存在透明胞外聚合物颗粒（$M(0) = 0$）。

图1具体展示了硅藻种群的指数增长，直至达到最终平台期；其生长率经数值计算为 0.335。

图2展示了系统 (S) 中六个变量 C、 N、 Q_C、 Q_N、D 和 M 的整体演化。

在最初的 10 天里，营养物供应十分充足，足以供养硅藻（其种群数量增加了 20 倍），营养盐浓度几乎维持在输入浓度的水平，同时细胞配额迅速增加，达到第一个平台期。从第 10 天到第 30 天，硅藻种群数量再次增加了 20 倍，营养物供应仍足以供养硅藻，尽管营养盐浓度略有下降，但细胞配额保持在第一个平台期的水平。在第 20 天至第 30 天之间，硅藻种群的指数增长结束，此后其数量仅增加了 7 倍：硝酸盐成为限制因素，其浓度降至输入浓度的大约 1/30，硅藻生长随之停止；硝酸盐细胞配额下降并达到第二个平台期。与此同时，碳营养物仍然充足，碳摄取不再与细胞生长相平衡，细胞碳配额再次增加。在接下来的阶段，即第 30 天至第 40 天，细胞碳配额达到峰值并停止增加：当 $Q_C/Q_N > \alpha$ 时，开始产生透明胞外聚合物颗粒（TEP）；碳摄取与 TEP 产生相平衡，而 Q_C 达到第二个平台期。最后一个阶段中，TEP 达到其最高浓度，系统保持在平衡状态。

5.2 参数辨识

系统 (S) 可改写为：

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = F(P, X), \quad X(0) = X^0, \tag{13}$$

其中变量 $X = (X_i)_{1 \le i \le 6} = (C,\ N,\ Q_C,\ Q_N,\ D,\ M)$，其初始条件 X^0 在第 5.1 节中引入（$X^0 = (C_{\mathrm{in}},\ N_{\mathrm{in}},\ Q^C_{\min},\ Q^N_{\min},\ D(0) = 10^5\,\mathrm{cell/L}\ M(0) = 0)$）；其中 $P \in \mathbb{R}^p$为假定恒定的模型参数：向量 P 由 15 个模型参数组成，但不包括 a、 C_{in}、 N_{in} 和 α，这些参数被视为问题数据，因此 $P \in \mathbb{R}^p$，其中 $p = 11$。

目标解 X^{tg} 是问题 (13) 在表 2 中参数 P^{tg} 下的解。考虑与图2相同的终止时间 $T = 50$ j。引入采样周期 $\delta t = T/m$ （其中 m为整数），相应的采样时刻为 $t_j = j\delta t$ ，

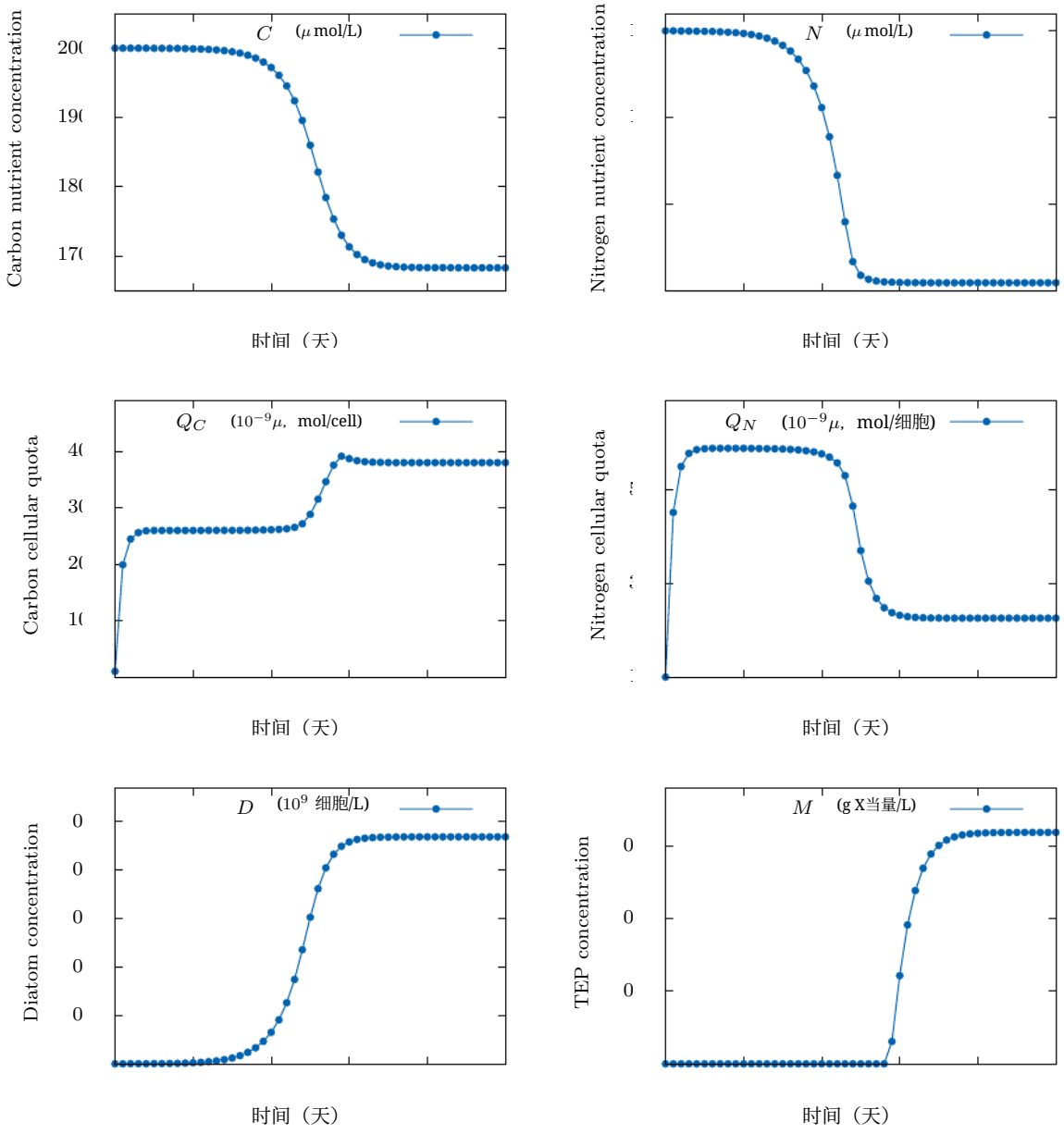

图2：系统（S）按表2中的参数演化。

$j = 1, \cdots, m$。我们的目标是最小化以下代价泛函 $\mathcal{L}$,

$$\mathcal{L}(P) = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{6} r_{ij}(P)^2, \quad r_{ij}(P) := X_i(t_j) - X_i^{\mathrm{tg}}(t_j) \tag{14}$$

当 $P = P^{\mathrm{tg}}$ 时，其值显然为 0。
关键论证是，根据定理1，可以对 $X(t)$ 关于 P 求导，从而计算泛函 $\mathcal{L}$的梯度。更准确地说，对式13中的常微分方程求导后，$\dfrac{\partial X}{\partial P}$ 满足以下常微分方程，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial X}{\partial P}\right) = \frac{\partial F}{\partial P}(X, P) + \frac{\partial F}{\partial t}(X, P)\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}X}, \quad \frac{\partial X}{\partial P}(0) = 0, \tag{15}$$

需要注意的是，初始条件 $\frac{\partial X}{\partial P}(0) = 0$ 源于这样一个事实：对于 $X(t)$，无论 P为何，均施加相同的初始条件 $X(0) = X^0$。
然后，通过求解耦合常微分方程组 13 15，数值计算导数 $\frac{\partial X}{\partial P}(t)$。因此，计算 $\nabla\mathcal{L}(P)$ 需要在时间区间 $[0, T]$ 上求解常微分方程组 13 15，并在每个采样时刻 t_j 存储 $X(t_j)$ 和 $\partial X/\partial P(t_j)$，以便得到，

$$\nabla\mathcal{L}(P) = 2\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{6}\left(X_i(t_j) - X_i^{\mathrm{tg}}(t_j)\right)\frac{\partial X_i}{\partial P}(t_j).$$

使用四阶龙格–库塔算法和 0.01 天的时间步长计算 $\nabla\mathcal{L}(P)$，以确保准确计算 $X(t)$ 和 $\partial X/\partial P(t)$。根据数值收敛性分析，基于 L^∞ 范数的误差已评估为低于 1E-7。

5.3 最小化算法

高斯-牛顿法 现简要回顾用于求解最小二乘问题的高斯-牛顿法。考虑待最小化的泛函，其中 $P \in \mathbb{R}^p$，

$$\mathcal{L}(P) = \mathbf{r}^T\mathbf{r}, \quad \mathbf{r} = (r_i(P))_{1\le i\le n}.$$

通过从初始猜测 P^0 开始并计算逐次近似$P^{i+1} = P^i + \delta$来使其最小化，其中每一步的增量 δ 均作为线性系统 $J^TJ\delta = -J^T\mathbf{r}(P^i)$ 的解计算；其中， $J \in \mathbb{R}^{n\times p}$是$\mathbf{r}$在点 P_i处的雅可比矩阵。注意，系统矩阵 $J^TJ \in \mathbb{R}^{p\times p}$是对称正定的，而且在实际应用中确实如此。

当 $\|\mathbf{r}\|_2 \le \varepsilon$时，算法便停止；更准确地说，在我们的情形下，当

$$\frac{\mathcal{L}(P)^{1/2}}{|X^{\mathrm{tg}}|_2} \le \mathrm{tol}, \quad |X^{\mathrm{tg}}|_2^2 := \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{6} X_i^{\mathrm{tg}}(t_j)^2 \tag{16}$$

给定容差 tol 时。

高斯-牛顿法的优点在于能够得到非常精确的数值解，而且收敛速度非常快。然而，其主要缺点是会引发不稳定性，尤其是在初始猜测不够准确时，可能导致常微分方程（13）的求解出现数值爆炸。如下文所述，可以考虑采用改进的高斯-牛顿法，以提高该方法的稳定性。

修正高斯–牛顿方法在高斯-牛顿法的每一步中，增量 δ 现在被视为下降方向。通过数值求解常微分方程 (13)，并使用参数 $P^i + h_k\delta$，从 $h_0 = 1$ 开始逐渐减小 h_k，以检测是否存在不稳定性，更准确地说，检测是否发生数值爆炸。确定安全的 $h_k \in$ 值（$(0, 1]$）后，使用黄金分割搜索来求出最佳下降步长 $h \in$（0，$h_k]$），随后通过设置 $P^{i+1} = P^1 + h\delta$结束当前算法步骤。

即使采用改进版高斯-牛顿法，不稳定性仍然是一个问题。也可以改用经典的梯度算法。这种算法稳定，但经过几步（通常为 2 到 3 步）后便会停止迭代，得到的数值解精度很差。不过，可以使用它来改善初始猜测的质量。

实际使用的最小化方法由于之前的各种方法（高斯-牛顿法、改进的高斯-牛顿法和梯度法）都不能完全令人满意，因此将考虑结合使用这些方法

这些方法。首先需要指出的是，当初始猜测 P^0 足够接近目标解 P^{tg}时，高斯-牛顿法非常精确且快速。随后，采用以下方法组合来构建一个精确的初始猜测，最后以高斯-牛顿法结束，容差在（16）式中设为 tol $= 10^{-10}$ ，最大迭代次数设为 50。

首先，我们不直接针对整个时间段$[0, T]$ 进行参数辨识，而是尝试在较短的时间段 $[0, T_{1/2}]$ 内预测 P（持续 $T_{1/2} = 20$ 天）。随后，将这些预测参数作为初始猜测，用于在时间段 $[0, T_{1/2} + 1]$ 内进行第二次参数辨识，依此类推，直至 $T_{1/2} + k = T$。

每个阶段都先进行几步（即 2 步）梯度法。随后采用改进的高斯-牛顿法，最多迭代 50 次，粗略容差为 10^{-4}；最后启动高斯-牛顿法，最多迭代 50 次，容差为 10^{-4}。

5.4 数值结果

通过将初始猜测分量设为 $P_i^0 = P_i^{\mathrm{tg}}$ （$1 + \theta_i$）来评估上一节介绍的算法，其中 θ_i 是给定振幅ε、$\theta_i \in [-\varepsilon, \varepsilon]$下随机生成的数值。使用该初始猜测启动参数辨识，并记录：

1. 是否成功找到解（失败与常微分方程 (13) 的求解过程发生爆破解有关），2. (16) 中定义的最终残差，

3. 数值确定的参数 P^{num} 与目标参数之间的最大相对误差 $\|P^{\mathrm{num}} - P^{\mathrm{tg}}\|_\infty / \|P^{\mathrm{tg}}\|_\infty$。

对于给定的振幅 ε，进行了 200 次此类实验，并将结果统计列于表 3、4 和 5 中，分别对应三种不同的采样周期：1天、半天和四分之一天。

振幅 ε	1 %	5 %	10 %	15 %	20 %	5 %	50 %
成功率（%）	87	88	72.5	55.5	42	32.5	19.5
平均残差	1E-7	2E-7	9E-7	3E-7	0.4	0.2	0.5
平均最大误差（%）	5E-5	3E-4	2E-2	1.0	12.	29.	26.

表3：采样周期为1天的数值结果

振幅 ε	1 %	5 %	10 %	15 %	20 %	5 %	50 %
成功率（%）	76.5	85	67.5	57.5	49.5	37.5	11.5
平均残差	6E-5	5E-6	6E-6	5E-6	4E-5	0.4	0.2
平均最大误差（以%计）	1E-3	1E-4	1E-3	2E-3	7E-2	13.	19.

表4：采样周期为0.5天时的数值结果

首先，即使扰动幅度仅为 1%，由于不稳定性，也无法完全保证收敛到数值解。扰动幅度较小时，算法成功率相当高；但随着扰动幅度增大，成功率会下降，在扰动幅度为 25% 时变得相当低。数值解的质量可以通过

振幅 ε	1 %	5 %	10%	15%	20%	5 %	50%	
成功率（%）	84	90	76.5	65	49	37	14.5	
平均残差	1E-6	1E-6	2E-6	2E-6	1E-6	0.6	0.3	
平均最大误差（%）	3E-4	3E-4	5E-4	3E-2	1E-2	14.	26.	

表5：采样周期为 0.25 天的数值结果

最终残差轻松控制：当数值解对应的残差非常小（低于 1E-5，通常出现在算法收敛时），数值解与目标参数之间的最大相对误差就非常小，通常低于 1E-2%。我们指出，这一数值表示最大误差；实际上，大多数参数的确定精度都高于 1E-10%，只有少数参数的预测精度较低。当残差较高，达到 1 或以上时，参数的预测精度会降低，但数量级仍然正确。同样需要指出的是，只有少数参数预测不准确，而大多数参数（例如 $\varepsilon = 50\%$例如）的相对误差低于 1%。这似乎表明，在泛函$\mathcal{L}$ 周围存在许多局部极小值 P^{tg}。

正如预期，缩短采样周期可以改善结果。不过，收益并不显著，因此对于当前应用而言，1天的采样周期似乎较为合适。

总之，利用恒化器实验数据对模型 (S) 进行参数辨识似乎是可行的。所提出的算法能够非常准确地辨识参数，但由于仍存在较强的不适定性，要求初始猜测具有较高质量。因此，似乎有必要采用耦合方法：首先使用通用最小化方法来优化泛函 $\mathcal{L}$ （见式 (14)），例如遗传算法 例如，以获得良好的初始猜测；然后再采用高斯—牛顿型方法完成参数辨识。这为该主题的进一步研究奠定了基础。

6 致谢

作者谨向 IRD（法国发展研究院）的 Xavier Mari 教授致谢，感谢他提供的宝贵讨论和参考资料。

作者谨向国家级卓越标签 I-SITE：能源与环境解决方案（E2S - UPPA）致谢，感谢其为本研究提供的经费支持。

参考文献

[1] Y. Aktan、A. Dede 和 P. S. Ciftci。土耳其马尔马拉海发生的与硅藻和甲藻相关的黏液事件。有害藻类新闻，政府间海洋学委员会-联合国教科文组织，1–3，2008年。[2] T. Alcoverro、E. Conte 和 L. Mazzella。在营养限制条件下，亚得里亚海底栖硅藻 Cylindrotheca closterium（硅藻纲）的黏液产生。藻类学杂志，36(6)：1087–1095，2000年。[3] A. E. Allen、C. L. Dupont、M. Oborn´ık、A. Hor´ak、A. Nunes-Nesi、J. P. McCrow、H. Zheng、D. A. Johnson、H. Hu、A. R. Fernie 和 C. Bowler。光合硅藻中尿素循环的演化及其代谢意义。《自然》，473(7346)：203–207，2011年。[4] I. Auby 和 N. Neaud-Masson。对当地称为“liga”的一种物质成分的鉴定，该物质沉积在圣让德吕兹近海的某些渔具上。

法国海洋开发研究院（Ifremer），2001年。 ’ https://archimer.ifremer.fr/doc/00076/18681/[5] M. E. Baird 和 S. M. Emsley。迈向浮游生物种群动态的机制模型。《浮游生物研究杂志》，21(1): 85–126，1999年。[6] N. Balkis-ozdelice、T. Durmu¸s 和 M. Balci。马尔马拉海中观测到的强烈远洋与底栖黏液现象初步研究。《环境与地理信息学国际期刊》，8(4): 414–422，2021年。[7] J. Barcelos e Ramos、K. G. Schulz、C. Brownlee、S. Sett 和 E. B. Azevedo。海水二氧化碳浓度升高对冰冷星杆藻链状形成的影响。PLoS ONE 9(3): e90749，2014年。[8] A. Barral、B. Gomez、F. Fourel、V. Daviero-Gomez 和 C. L´ecuyer。白垩纪温室期百万年尺度上二氧化碳与温度的解耦。《科学报告》，7: 8310，2017年。[9] A. Bartual、I. V. Cera、S. Flecha 和 L. Prieto。溶解态多不饱和醛对实验性硅藻水华中透明胞外聚合物颗粒粒径分布的影响。《海洋生物学》，164: 120，2017年。[10] D. J. Beerling 和 D. L. Royer。新生代二氧化碳历史的趋同。《自然地球科学》，4(7): 418–420，2011年。[11] T. Brembu、A. Muhlroth、L. Alipanah L 和 AM. Bones。磷限制对硅藻碳代谢的影响。《英国皇家学会哲学汇刊B辑》，372: 20160406，2017年。[12] H. Br´ezis。《希尔伯特空间中的最大单调算子与收缩半群》。《北荷兰数学研究》，5。数学札记（50）。阿姆斯特丹-伦敦：North-Holland Publishing Comp.；纽约：American Elsevier Publishing Comp., Inc.，183页，1973年。[13] M.A. Brzezinski。海洋硅藻的 Si:C:N 比：种间变异性及若干环境变量的影响。藻类学杂志，21(3): 1985，347-357。[14] A. B. Burd、J. P. Chanton、K. L. Daly、S. Gilbert、U. Passow 和 A. Quigg。海洋油雪与海洋油雪沉降与絮凝背后的科学：过去、现在与未来。《海洋学进展》，187:102398，2020年。[15] S. Burkhardt、G. Amoroso、U. Riebesell 和 D. S¨ultemeyer。适应不同二氧化碳浓度的海洋硅藻对二氧化碳和碳酸氢根的摄取。《湖沼学与海洋学》，46(6):1378–1391，2001年。[16] A. Bussard。硅藻对环境胁迫的适应能力。博士论文，法国国家自然历史博物馆——自然与人类科学，2015年。[17] E. Buzzelli、R. Gianna、E. Marchiori 和 M. Bruno。营养因素对咖啡双眉藻小型变种黏液产生的影响。《大陆架研究》，17(10): 1171–1180，1997年。[18] M. Cadier。伊鲁瓦兹海浮游植物群落多样性与环境因素的关系：三维建模方法。博士论文，海洋环境科学实验室，tel.archives-ouvertes.fr/tel-01383247，2016年。[19] S. Calvo、R. Barone 和 L. Flores。1991—1992年西西里海岸黏液聚集体的观测。《整体环境科学》，165(1): 23–31，1995年。[20] P. Cerme˜no。海洋硅藻的地质史与最后一代化石燃料。《藻类学展望》，3(2): 53–60，2016年。

[21] J. Chen 和 D. Thornton。温度和生长率对海链藻产生透明胞外聚合物颗粒的影响。藻类学杂志，47:S64–S64，2011年。[22] J. Cortes。不连续动力系统。IEEE 控制系统杂志，28(3): 36–73，2008年。[23] R. Danovaro、S. Fonda Umani 和 A. Pusceddu。气候变化以及海洋黏液和微生物病原体在地中海潜在扩散。《PLoS ONE》，4(9): e7006，2009年。[24] A. Dauta。浮游植物生长的条件。 ´比较研究八种培养物种的行为。II. 营养物质的作用：同化与细胞内储存。Annls Limnol.，18 (3): 263-292，1982年。[25] D. Degobbis、R. Precali、C. R. Ferrari、T. Djakovac、Attilio Rinaldi、I. Ivancic、M. Gismondi 和 N. Smodlaka。1999—2002年黏液团事件期间营养盐浓度及比例的变化。《整体环境科学》，353:103–114，2005年。[26] P. Del Negro、E. Crevatin、C. Larato、C. Ferrari、C. Totti、M. Pompei、M. Giani、D. Berto 和 S. Fonda Umani。黏液团微宇宙。《整体环境科学》，353(1):258–269，2005年。[27] M. Droop。维生素B12与海洋生态学。IV. 路德单鞭金藻的摄取、生长与抑制动力学。英国海洋生物学会学报，48(3): 689–733，1968年。[28] S. Dutkiewicz、M. J. Follows 和 J. G. Bragg。海洋生态学与生物地球化学耦合的建模。《全球生物地球化学循环》，23: GB4017，2009年。[29] J. Elser、R. Sterner、E. Gorokhova、W. Fagan、T. Markow、J. Cotner、J. Harrison、S. Hobbie、G. Odell 和 L. Weider。从基因到生态系统的生物化学计量学。《生态学快报》，3(6):540–550，2000年。[30] L. C. Evans 和 R. F. Gariepy。《测度论与函数的精细性质》，修订版。Chapman and Hall/CRC，2015年。[31] K. J. Flynn 和 A. Mitra。浮游生物模型研究者为何应重新考虑使用捕食者-猎物相互作用的矩形双曲线（米氏、莫诺德）描述。《海洋科学前沿》，3:165，2016年。[32] M. J. Follows、S. Dutkiewicz、S. Grant 和 S. W. Chisholm。模型海洋中微生物群落涌现的生物地理格局。《科学》，315:1843–1846，2007年（及在线补充材料）。[33] T. Fukao、K. Kimoto 和 Y. Kotani。从海洋黏液中分离的格氏圆筛藻，其细胞生长和透明胞外聚合物颗粒产生受温度影响。《应用藻类学杂志》，24(2):181–186，2012年。[34] N. Garc´ía、J. A. L´opez-El´ías、A. Miranda、M. Mart´ínez-Porchas、N. Huerta 和 A. Garc´ía。盐度对海链藻在三个培养阶段的生长和化学组成的影响。《拉丁美洲水生研究杂志》，40(2):435–440，2012年。[35] J. L. Genzer、M. Kamalanathan、L. Bretherton、J. Hillhouse、C. Xu、P. H. Santschi 和 A. Quigg。硅藻暴露于原油和化学分散剂时的聚集：海洋酸化的潜在影响。PLoS ONE 15(7): e0235473，2020年。[36] V. Girard、S. Saint Martin、J.-P. Saint Martin、A. R. Schmidt、S. Struwe、V. Perrichot、G. Breton 和 D. N´eraudeau。上阿尔布阶琥珀中海洋硅藻的特殊保存。《地质学》，37(1):83–86，2009年。[37] D. M. Harwood、V. A. Nikolaev 和 D. M. Winter。白垩纪硅藻演化、辐射演化与扩张的记录。《古生物学会论文集》，13:33–59，2007年。

[38]C. Heemann. 浮游植物胞外分泌¨与海水碳酸盐化学的依赖关系。 论文，不来梅大学，2002年。[39]M. Hein 和 K. Sand-Jensen。二氧化碳增加海洋初级生产。《自然》，388(6642):526–527，1997年。[40] D. O. Hessen 和 T. R. Anderson。水生生物和生态系统中的过量碳：生理、生态与演化方面的影响。《湖沼学与海洋学》，53(4):1685–1696，2008年。[41] S. Joergensen、M. Friis 和 J. Henriksen。《环境数据与生态参数手册》。1979年。[42] A. M. Johnston 和 J. A. Raven。海洋硅藻三角褐指藻的无机碳积累。《欧洲藻类学杂志》，31(3):285–290，1996年。[43] C. A. Klausmeier、E. Litchman、T. Daufresne 和 S. A. Levin。浮游植物的最优氮磷化学计量比。《自然》，429(6988):171–174，2004年。[44] C. A. Klausmeier、E. Litchman 和 S. A. Levin。多种营养盐限制下浮游植物的生长与化学计量关系。《湖沼学与海洋学》，49(4，第2部分):463–1470，2004年。[45] T. Legovic 和 A. Cruzado。基于米氏-蒙诺摄取、Droop生长和李比希定律的多种营养盐条件下浮游植物生长模型。《生态建模》，99:19–31，1997年。[46] O. Levitan、J. Dinamarca、E. Zelzion、D. S. Lun、L. T. Guerra、M. Kyung Kim、J. Kim、B. A. S. Van Mooy、D. Bhattacharya 和 P. G. Falkowski。氮胁迫下三角褐指藻中间代谢的重塑。《美国国家科学院院刊》，112(2):412–417，2015年。[47] E. Litchman、C. Klausmeier、O. Schofield 和 P. Falkowski。功能性状和权衡在浮游植物群落构建中的作用：从细胞层级到生态系统层级的尺度变化。《生态学快报》，10(12):1170–1181，2007年。[48] L. MacKenzie、I. Sims、V. Beuzenberg 和 P. Gillespie。新西兰塔斯曼湾甲藻多糖分泌物导致的黏液质大量积累。《有害藻类》，1:69–83，2002年。[49] X. Mari、U. Passow、C. Migon、A. B. Burd 和 L. Legendre。透明胞外聚合物颗粒：对海洋碳循环的影响。《海洋学进展》，151:13–37，2017年。[50] A. C. Martiny、J. A. Vrugt 和 M. W. Lomas。全球海洋中颗粒有机碳、氮和磷的浓度及比值。《科学数据》，1(1):140048，2014年。[51] M. Mecozzi、E. Pietrantonio、V. Di Noto 和 Z. Papai。亚得里亚海和第勒尼安海黏液质聚集体的腐殖质结构：关于黏液质形成合理原因的假说。《海洋化学》，95:255–269，2005年。[52] F. Murat 和 C. Trombetti。分段光滑函数与向量值函数复合的链式法则公式。《意大利数学联盟通报》，8，6-B(3):581–595，2003年。[53] J. M. Nakov、T. M. Beaulieu 和 A. J. Alverson。加速多样化与微生物真核生物（硅藻，硅藻门）一个高度多样化谱系的生活史和运动方式相关。《新植物学家》，219:462–473，2018年。[54] U. Passow。溶解前体物质形成透明胞外聚合物颗粒（TEP）。《海洋生态学进展丛刊》，192:1–11，2000年。

[55] A. Peace、H. Wang 和 Y. Kuang。纳入食物营养含量过剩对摄食者生长影响的生产者–摄食者模型动力学。《数学生物学公报》，76:2175–2197，2014年。[56] J. Renaudie。新生代海洋硅藻沉积史的定量研究：与碳循环和硅循环的联系。《生物地球科学》，13(21):6003–6014，2016年。[57] C. S. Reynolds。浮游植物黏液质供应和功能的变异性：对环境的兼性响应。《水生生物学》，578(1):37–45，2007年。[58] U. Riebesell、K. G. Schulz、R. G. J. Bellerby、M. Botros、P. Fritsche、M. Meyerh¨ofer、C. Neill、G. Nondal、A. Oschlies、J. Wohlers 和 E. Z¨ollner。高二氧化碳海洋中生物碳消耗增强。《自然》，450(7169):545–548，2007年。[59] S. A. Sa˜nudo-Wilhelmy、A. Tovar-Sanchez、F. X. Fu、D. G. Capone、E. J. Carpenter 和 D. A. Hutchins。表面吸附磷对浮游植物雷德菲尔德化学计量比的影响。《自然》，432(7019):897–901，2004年。[60] O. Sayanova、V. Mimouni、L. Ulmann、A. Morant-Manceau、V. Pasquet、B. Schoefs 和 J. A. Napier。胁迫对硅藻脂质生物合成的调节。《英国皇家学会哲学汇刊B辑》，372:20160407，2017年。[61] S. Scala 和 C. Bowler。关于硅藻生物学新方面的分子见解。《细胞与分子生命科学》，58:1666–1673，2001年。[62] M. Schapira。东部英吉利海峡球形棕囊藻的时空动态：湍流和营养盐偶发输入的影响。博士论文，UMR 8013 ELICO：滨海生态系统，不来梅大学，2005年。[63] J. Seckbach 和 J. P. Kociolek。《硅藻世界：细胞起源、极端栖息地生命与天体生物学》，第19卷，2011年。[64] J. L. Serra、M. J. Llama 和 E. Cadenas。硅藻中肋骨条藻的硝酸盐利用：II. 硝酸盐吸收的调控。《植物生理学》，62(6):991–994，1978年。[65] V. Smetacek。硅藻与海洋碳循环。《原生生物》，150(1):25–32，1999年。[66] S. R. Smith、C. L. Dupont、J. K. McCarthy、J. T. Broddrick、M. Oborn´ík、A. Hor´ák、Z. F¨ussy、J. Cihl´aˇr、S. Kleessen、H. Zheng、J. P. McCrow、K. K. Hixson、W. L. Ara´újo、A. Nunes-Nesi、A. Fernie、Z. Nikoloski、B. O. Palsson 和 A. E. Allen。海洋硅藻区室化代谢网络中氮通量的演化与调控。《自然·通讯》，10(1):4552，2019年。[67] N. Susperregui。“Liga”：巴斯克海岸的海洋黏液质。新闻资料，法国比利牛斯-大西洋省—朗德省海洋渔业与海洋养殖跨省委员会，2019年6月。[68] N. Susperregui。个人通讯。[69] D. C. O. Thornton。考马斯亮蓝可染颗粒（CSP）：海洋中含蛋白质的胞外聚合物颗粒。《海洋前沿》，5，206页，2018年。[70] A. Torstensson、M. Hedblom、M. Mattsdotter Bj¨ork、M. Chierici 和 A. Wulff。南极硅藻 Lecointe 菱形藻长期适应高 pCO_2 水平环境会改变碳代谢并降低生长。《英国皇家学会学报B辑：生物科学》，282(1815):20151513，2015年。[71] D.H. Turpin。浮游植物资源竞争中的生理机制。《淡水浮游植物的生长与繁殖策略》，剑桥大学出版社，1988年。[72] Z. Wei、T. Xuexi、Y. Yingying、Z. Xin Zhang 和 Z. Xinxin。升高的 pCO_2 水平影响三角褐指藻的胞外聚合物代谢。《微生物学前沿》，11：文章339，2020年。[73] P. Zahajsk´a、S. Opfergelt、S. C. Fritz、J. Stadmark 和 D. J. Conley。什么是硅藻土？《第四纪研究》，96:48–52，2020年。