准多细胞蓝细菌聚集体散射特性的不变性

Chunyang Ma [1, 2]*、Qian Lu [3]、Yen Wah Tong [2, 4]*

[1] 南昌大学先进制造学院，中华人民共和国南昌市学府大道*999*号，邮编*330031*。

[2] 新加坡国立大学环境研究所，新加坡国立大学，*Create Way 1*号，*Create Tower # 15-02*，新加坡*138602*。

[3] 江苏科技大学粮食科学与技术学院，中国镇江市，邮编*212100*。

[4] 新加坡国立大学化学与生物分子工程系，*Engineering Drive 4*号*4*号，新加坡*117585*。

摘要

蓝细菌聚集体的辐射/散射特性对于理解微藻培养至关重要。本研究采用离散偶极近似（DDA）方法，分析了蓝细菌聚集体的散射矩阵元素和截面。研究采用随机游走方法，为多细胞丝状蓝细菌聚集体生成了一种力偏置堆积模型。本研究考察了多细胞蓝细菌聚集体的形状和尺寸对其散射特性的影响，并探索了蓝细菌聚集体散射特性的不变性可能。不变性解释直观地呈现了聚集体的辐射特性。研究结果表明，蓝细菌聚集体的矩阵元素比值具有近似的形状、尺寸和波长不变性。

聚集体的消光和吸收截面（EACS）单位体积值分别具有形状不变性和近似尺寸不变性。对于超过一定尺寸的聚集体，吸收截面不再仅仅是一种体积现象。此外，单位体积吸收截面与微藻细胞的体积分布无关。不变性解释揭示了蓝细菌聚集体散射特性的关键特征。 不变性的存在极大地增进了我们对微藻聚集体散射特性的理解。 在光生物反应器的设计、优化和运行中，微藻聚集体的散射特性是光传播最关键的方面。

关键词： 辐射特性、散射、离散偶极子近似、聚集体、蓝细菌、微藻

---

*C通讯作者：cyma@ncu.edu.cn（CY Ma），chetyw@nus.edu.sg（YW Tong） .

1. 引言

微藻基生物材料是前景广阔的可再生能源，已在制药业、环境保护、碳中和生物燃料和太空食品补充剂领域受到广泛关注 [1]，环境保护 [2]，碳中和生物燃料 [3] 和太空食品补充剂 [4]。人们普遍认识到，微藻是可再生的绿色能源，这意味着

微藻生物质在使用过程中不会产生净 CO_2 排放。这种平衡是通过培养过程中基于微藻的二氧化碳（CO_2）吸收，以及下游产业利用生物质时释放 CO_2 来实现的。因此，微藻生物质有助于实现碳中和目标 [5, 6]。

目前，微藻的高培养成本严重限制了其实际应用 [7]。尽管如此，我们对微藻光合作用和生产已有较为深入的认识。微藻培养受到光强、营养物浓度、pH 值和温度的影响 [8-10]。微藻悬浮液中的光场是影响最大的因素之一。过量的光供应可能导致光抑制，而光照不足则会对藻细胞的光合作用产生负面影响 [11]。藻细胞与光照之间的相互作用可以通过微藻细胞的散射特性来表征，包括吸收截面、散射截面、消光截面、散射相函数（SPF）以及穆勒矩阵元素。因此，散射特性被认为是影响微藻培养物内部光传递的关键因素。

诚然，先前的研究测量了大量与微藻辐射特性相关的数据。Berberoglu 和 Pilon [12] 通过实验测量了 *Anabaenavariabilis* 和 *Rhodobacter sphaeroides* 在 300–1300 nm波长范围内的EACS，以及微藻在可见光波长下的散射相函数。Berberoglu 等人 [13,14] 还报告了微藻的实测辐射特性，包括吸收截面、散射截面、散射相函数，以及七种以上不同藻株（如*Botryococcus braunii*、绿球藻属）的藻细胞尺寸分布。

littorale，以及 莱茵衣藻。因此，Heng 和 Pilon [15]通过实验研究了分批培养条件下不同生长时间的 *Nannochloropsis oculata*的辐射特性。Liu 团队研究了典型绿藻和蓝细菌微藻随时间变化的辐射特性，并提出了一种时间尺度定律，用于描述随培养时间变化的光学性质 [16-18]。因此，微藻辐射特性的研究经历了从静止状态到生长状态的发展阶段，体现了人们对微藻生长过程认识的不断深化。

除了实验测量方面的进展，先前的研究还通过理论研究分析了微藻的散射特性。通常采用洛伦兹-米氏理论来估算球形单细胞微藻细胞的散射特性 [19, 20]。Dauchet等人 [21]和Dong等人 [22]研究了细胞内部或外部结构对微藻散射特性的影响。Bhowmik和Pilon [23] 进一步利用T矩阵计算方法，研究单细胞光合自养球形藻细胞的光学性质能否用单个适当的光学均匀球形细胞模型或双层球形模型来描述。他们证实，均匀球形框架能够准确预测内部不均匀微藻的EACS。Heng等人 [24] 和Kandilian等人 [25] 报告了由球形单体组成的规则和不规则群体的光学性质及其有效粒子近似框架。Lee和Pilon [26] 研究了长链且随机取向的球链的吸收和散射，以近似模拟一些真实的蓝细菌。

这些研究发现，可以利用无限长圆柱体解来确定链状微藻单位长度的吸收截面和散射截面。Ma等人 [27] 利用不同的细胞形状和等效光学模型，研究了多细胞蓝藻的光谱辐射特性。研究发现，体积等效均匀圆柱体模型能够很好地预测多细胞丝状蓝藻的EACS截面和偏振相关的穆勒矩阵元素。这些结果表明，对于球形微藻和多细胞丝状蓝细菌，均可采用光学均匀模型来确定其辐射特性。Hoeniges等人 [28] 研究了球形*Botryococcus braunii*分形细胞群落的散射和吸收特性及有效包覆球近似。然而，多细胞丝状蓝藻聚集体的散射特性仍是一个亟待研究的重要问题。本研究旨在探讨不同形状蓝细菌聚集体的光谱散射特性，具体而言，研究多细胞长链状蓝藻聚集体的散射特性对于解释和理解微藻生长的作用。

本研究探讨了蓝细菌聚集体的散射特性，并为理解和测量光与光合微藻聚集体之间的相互作用提供了理论方法。采用 DDA数值方法报告了多细胞丝状蓝细菌聚集体的光谱散射特性。研究了微藻聚集体的形状和尺寸对散射矩阵元素及截面的影响。为了解释这些结果， the

截面每单位体积的截面被引入，用于表征微藻聚集体的特性。此外，本文展示了微藻聚集体内部的内部电场，以解释截面变化的物理机制。这项研究将加深对微藻聚集体散射特性的理解，并推动对多细胞丝状蓝细菌聚集体辐射特性的研究。

2. 光自养蓝藻聚集体模型

2.1. 蓝细菌聚集体

从位于中国武汉的 FACHB 淡水藻种质库购得*Nostoc* sp。 。*Nostoc* sp。在工作体积为 100 mL 的生物反应器中培养。生物反应器置于培养箱内，培养条件为先黑暗 12 小时，再光照 12 小时，并使用荧光灯进行照明，光照强度为 2000–2500 lx。培养环境温度保持在 25 oC。使用 BG11培养基培养*Nostoc sp.*。

微藻是生长于自然环境或人工光生物反应器中的光合微生物。在某些环境条件下，微藻培养物会形成非运动性群体 [29]。例如，Ratcliff等人 [30] 证明了莱茵衣藻的多细胞复杂性，它由单个细胞发育而来。一些微藻菌株会分泌胞外多糖，这是一种黏性物质，会覆盖微藻细胞的表面，并使其聚集成群体 [31]。此外，由于细胞浓度较高，微藻会发生聚集。

细胞之间的静电力 [32]。

图 1 展示了不同放大倍数下念珠藻 *sp.*的显微图像。如图所示，念珠藻 *sp.* 的直径为 2-4 μm，长度超过 40 μm，细胞近似呈椭圆形。蓝细菌通常由多个细胞组成，细胞形状多样，如球形、椭圆形和圆柱形 [26]。

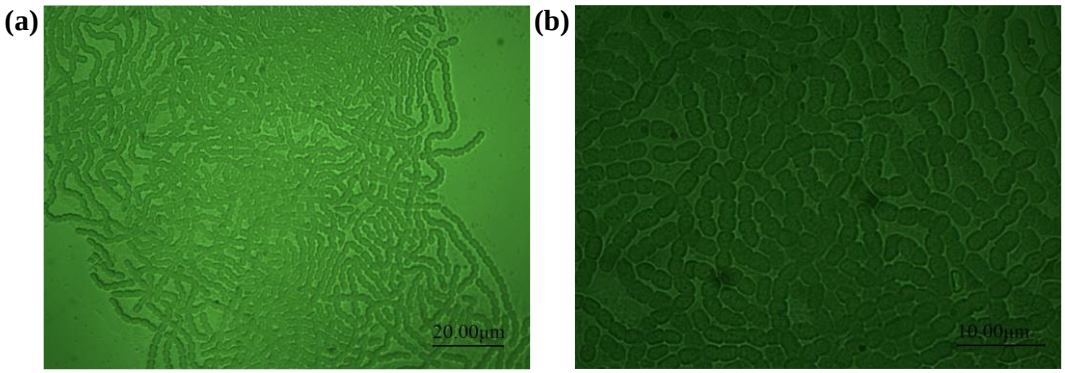


图 1. 念珠藻 *sp.*的显微图像：（a）40 倍；（b）100 倍，群体形似聚集体。

2.2. 聚集体模型的建立

微藻细胞在培养过程中通常会形成聚集体。分形模型通常用于模拟球形单细胞微藻群体。蓝细菌为多细胞物种，形状呈长直链或弯曲链。忽略细节时，蓝细菌的形状更像弯曲的纤维。我们采用随机模型，将力偏置堆积法推广至呈球形链状的多细胞丝状蓝细菌，从而能够考虑蓝细菌链的细节。该方法基于随机游走法，[33]

$$P = \{p_0, \ldots, p_n\}, p_i = (x_i, \mu_i, r_i) \quad (1)$$

其中 是 随机游走点的序列。 此处应理解为

随机游走点与其半径和当前方向有关。初始坐标在立方体中均匀分布，半径 r 和样本数 n 可对整个系统设为固定值。取向 x_0 可由取向分布 [34]

β

$$p(\theta,\phi\mid\beta)=\frac{\beta\sin\theta}{4\pi\left[1+\left(\beta^2-1\right)\cos^2\theta\right]^{3/2}} \tag{2}$$

其中 (θ,ϕ) 是取向的极坐标。全局参数 μ_0 用于描述取向分布的特征，而 β 此处为各向同性取向分布选择了该值。蓝细菌聚集体的弯曲特征由两个参数间接控制：$\beta=1$ 和，它们位于多元 von Mises–Fisher 分布中[33]

κ_1 κ_2

$$f\left(\mu\mid\mu_1,\kappa_1,\mu_2,\kappa_2\right)=c\left(\mu_1,\kappa_1,\mu_2,\kappa_2\right)\exp\left(\kappa_1\mu_1^T\mu+\kappa_2\mu_2^T\mu\right) \tag{3}$$

其中 μ_1，且 μ_2 是两个优选方向，而 κ_1 和 κ_2 则分别表示控制弯曲的可靠性参数。因子 $c(\mu_1,\kappa_1,\mu_2,\kappa_2)$ 用于归一化。这里，优选方向根据初始链方向和前一个点的方向确定。因此，κ_1 和 κ_2 分别描述纤维的主要取向和最后取向的可靠性，从而确定弯曲平滑度。细胞聚集体堆积通过施加排斥力来避免链之间发生交叉，并通过施加恢复力来确保链结构形成硬核聚集体系统 [33]。采用随机游走方法形成最终聚集体的过程，是排斥力与恢复力之间达到平衡的结果。在这一过程中，当总力强度降低至某一阈值时，将依据相应判据停止实际的聚集体模型生成。所得细胞

链可用作蓝细菌聚集体的模型，以便进行后续计算。

图 2 展示了使用蓝细菌组分数量输入参数 = 121 得到的模型实现，其蓝细菌取向呈各向同性分布。聚集体中的蓝细菌对象数量根据所需体积分数确定。此外，下方给出了每种实现对应的实际体积分数。

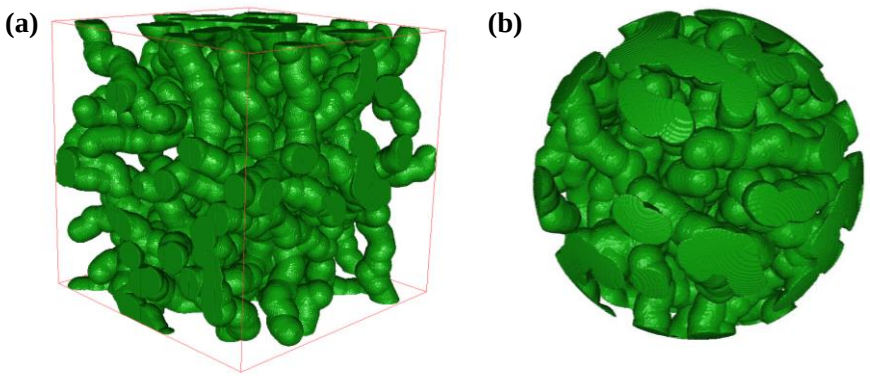


图 2. 堆积微藻聚集体的实现。 以下为典型参数 :

样本数 = 30 每条链的弯曲参数 = 5 和 = 5 是所需方向上的可靠性指标。体积分数分别为 (a) 37.9%，以及 (b)

44.8%.

高斯随机球体在球面维度中的半径向量定义为 [35]

$$\mathbf{r}(\vartheta,\varphi)=\frac{a\exp\left[s(\vartheta,\varphi)\right]}{\sqrt{1+\sigma^2}}\mathbf{e}_r \tag{4}$$

$$s(\vartheta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}s_{lm}Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{5}$$

其中 以及 分别是半径向量的均值和相对标准差， 是球坐标， 是所谓的对数半径， 是沿方向 向外指的单位向量，以及 正交归一球面

( )

谐波，以及 均值为零的高斯随机变量。均值为零、方差为的高斯随机变量的实部和虚部可以分别表示为[35]

$$\mathrm{Var}\left[\mathrm{Re}\left(s_{lm}\right)\right]=\left(1+\delta_{m0}\right)\frac{2\pi}{2l+1}\ln\left(1+\sigma^{2}\right)C_{l}, \tag{6}$$

$$\mathrm{Var}\left[\mathrm{Im}\left(s_{lm}\right)\right]=\left(1-\delta_{m0}\right)\frac{2\pi}{2l+1}\ln\left(1+\sigma^{2}\right)C_{l}, \quad l=0,1,...,\infty, \quad m \quad 0,1,...,l=, \tag{7}$$

其中 是狄拉克δ函数，且 是次数为的勒让德多项式的非负权重。此外，协方差函数 描述了随机变量 和 的自协方差，其由勒让德多项式级数给出，[35]

$$\sum_{s}(\gamma)=\ln\left(1+\sigma^{2}\right)\sum_{l=0}^{\infty}C_{l}P_{l}\left(\cos\gamma\right) \tag{8}$$

其中 表示.....的两个方向之间的角距离 和。 要使勒让德多项式成立，必须满足

$$\sum_{l=0}^{\infty}C_{l}=1 \tag{9}$$

实际上，式（5）至（9）中的无穷级数表示通常需要截断到某个阶数，截断阶数由决定。因此，高斯随机球体可以完全由平均半径 和勒让德多项式系数确定。此外，通常可以使用表示该形状的传统幂律协方差函数，[36]

$$C_{l}=\frac{\tilde{C}}{l^{\nu}}, \quad l=2,3,...,l_{\max} \tag{10}$$

$$\text{最大} = \left|\sum \quad -\nu\right| \quad \cdot \; n\text{C}\,1$$

其中，其中是归一化常数。因此，高斯随机球体可以由相对标准差、幂律指数和截断阶数 。幂律协方差函数之所以被选用，是因为它便于精细控制模型尺寸和平移变化，并且已被广泛用于对各种形状的天然细胞进行建模。

σ

ν $l_{\max}$

图3展示了高斯形微藻聚集体系统。结果通过结合高斯随机球体和随机游走的蓝细菌聚集体获得。高斯随机球体使用相同的随机数序列生成，因此，形状差异源于对球谐系数的不同加权。密集微藻系统实现的随机游走对于两种不同的高斯球情况是相同的。因此，图3(a)和(b)所示情况下的所有差异主要源于高斯球的外部形状。

s_{lm}

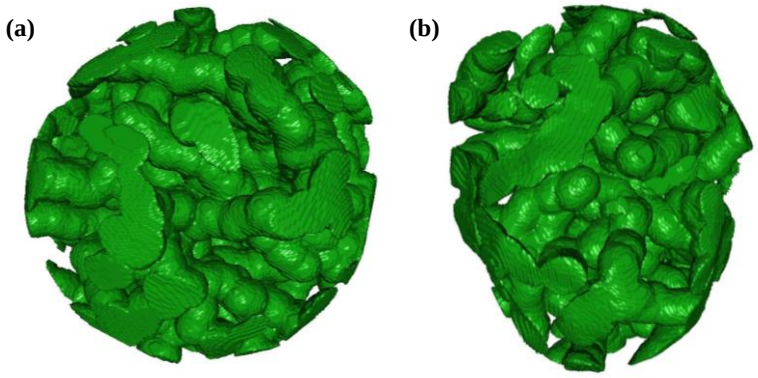


图3. 具有幂律的高斯形球形微藻聚集体系统实现。

索引 ν=3.5，截断阶数 = 50，径向距离的相对标准差=0.05 和 0.10（从左到右）。微藻 σ $l_{\max}$ 聚集体的共同参数与前文相同，体积分数分别为 (a) 45.5% 和 (b) 45.4%。

3. 散射理论与方法

3.1. 洛伦兹-米氏理论综述

洛伦兹–米氏散射被视为麦克斯韦方程组对均匀球体的重要解。了解球形粒子的散射至关重要。在此，选取蓝细菌聚集体的外部形状，并将其视为近似球形。因此，可以采用洛伦兹–米氏散射理论分析并计算微藻聚集体的散射/光学性质。根据电磁散射理论 [37], 该 入射场和散射场可用均匀球体的矢量球谐函数表示。外部散射场的系数可表示为

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi_n'(x) - \psi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x) - \xi_n(x)\psi_n'(mx)} \tag{11}$$

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi_n'(x) - m\psi_n(x)\psi_n'(mx)}{\psi_n(mx)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\psi_n'(mx)} \tag{12}$$

内部电磁场系数的表达式可写为

$$c_n = \frac{m\psi_n(x)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\psi_n'(x)}{\psi_n(mx)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\psi_n'(mx)} \tag{13}$$

$$d_n = \frac{m\psi_n(x)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x) - \xi_n(x)\psi_n'(mx)} \tag{14}$$

其中 为x尺寸参数， 表示球体介质的m复数光学常数。里卡蒂–贝塞尔函数表示为

$$\psi_n(x) = xj_n(x), \qquad \xi_n(x) = xh_n(x) \tag{15}$$

其中 和 分别为球贝塞尔函数和汉克尔函数。观察内部和外部电磁场系数的表达式可以发现， 和 的分母相同， 和 的分母也相同。这表明，对于相同的 和 参数，内部场和散射场模式会发生共振。这可用于分析和理解内部电场与外部散射电场之间的关系。对所有方向上的散射功率进行积分可得到散射截面，而利用光学定理可得到消光截面 [37]

$$C_{sca} = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2) \tag{16}$$

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)\,\mathrm{Re}\,(a_n + b_n) \tag{17}$$

其中 表示波数。上述公式有助于理解单个颗粒的辐射/光学性质。我们已在上文回顾了洛伦兹-米氏理论，尽管此前只直接展示过一次该理论的计算。与其他数值方法相比，米氏理论的解析解具有较高的计算效率，尤其适用于大颗粒或微藻聚集体。此外，洛伦兹-米氏理论对于理解细胞颗粒及其聚集体的散射特性至关重要。

3.2. 粒子散射

根据电磁理论，入射场和散射场可通过振幅散射矩阵相关联对于任意粒子 [37]

S

$$\mathbf{I}_s = \frac{1}{k^2 r^2}\mathbf{S}\,\mathbf{I}_i \tag{18}$$

其中，$\mathbf{I}_i$且 分别$\mathbf{I}_s$表示入射光场的入射和散射斯托克斯矢量参数。并且 表示散射体到观测点的距离， 为波数。对于任意球体，振幅散射矩阵为分块对角矩阵，其非零元素为 ， ， ， ， ， 以及 ，r并且 和 相等， 与 也相等，这是由于散射振幅矩阵中的非对角元素等于零所致， [37]。散射相函数 可利用振幅散射矩阵元素 [37]

k

S_{11} $S_{12}=S_{21}$ S_{22} S_{33} $S_{34}=-S_{43}$ S_{44}

S_{11} S_{22} S_{33} S_{44}

( )

S_{11}

$$\Phi(\cos\Theta) = \frac{4\pi\, S_{11}}{\mathrm{k}^2 C_{sca}} \tag{19}$$

这表明，立体角范围内沿方向传播的光 周围的 散射到立体角范围内的方向 周围的光的可能性有多大。 对于非偏振入射波，散射矩阵比值 表示散射光的线偏振度。此外，$\mathbf{s}'$元素比值，它对于完美球体等于 1，$d\Omega$并且 描述了散射颗粒的$\mathbf{s}$非球形特征[38]。

S_{12}/S_{11}

S_{22}/S_{11}

3.3. 离散偶极子近似法

采用离散偶极子近似法（DDA）研究微藻聚集体的散射特性。DDA 是一种广泛使用的方法，用于求解任意形状颗粒或聚集体的散射场解 [27, 39, 40]。将散射体划分为离散偶极子，以表示颗粒或聚集体。基于该近似，通过求解一组线性方程得到电场值。该解

对于生物颗粒的离散偶极子近似由于水中接近于1的相对复杂折射率而更加准确[41]。因此，离散偶极子近似法在计算微藻群体的散射特性方面具有天然优势。在我们的离散偶极子近似计算中，使用了Yurkin等人发布的ADDA代码 [42, 43]。ADDA可以通过消息传递接口实现并行运行，从而缩短计算时间。此外，Inzhevatkin和Yurkin [44] 报告称，将Wentzel-Kramers-Brillouin及其改进方法作为离散偶极子近似迭代求解过程的初始猜测，可以在保持相同精度的情况下提高计算效率。这些特性有利于计算微藻聚集体的散射特性。图4显示了不同 每波长偶极子数（dpl） 值下立方体微藻聚集体模型（图2 a）的散射矩阵元素。折射率为1.021，吸收指数为1.12×10^{-5}。矩阵元素是对五种不同取向进行取向平均后的结果。聚集体沿x方向的尺寸为16.8 μm。显然，与dpl = 12相比，dpl = 6 时各元素已收敛。在后续模拟中，dpl值大于6，以确保收敛。对于每次实现，散射特征均对五种不同取向进行取向平均。计算中使用了立方偶极子极化率的晶格色散关系（LDR）。

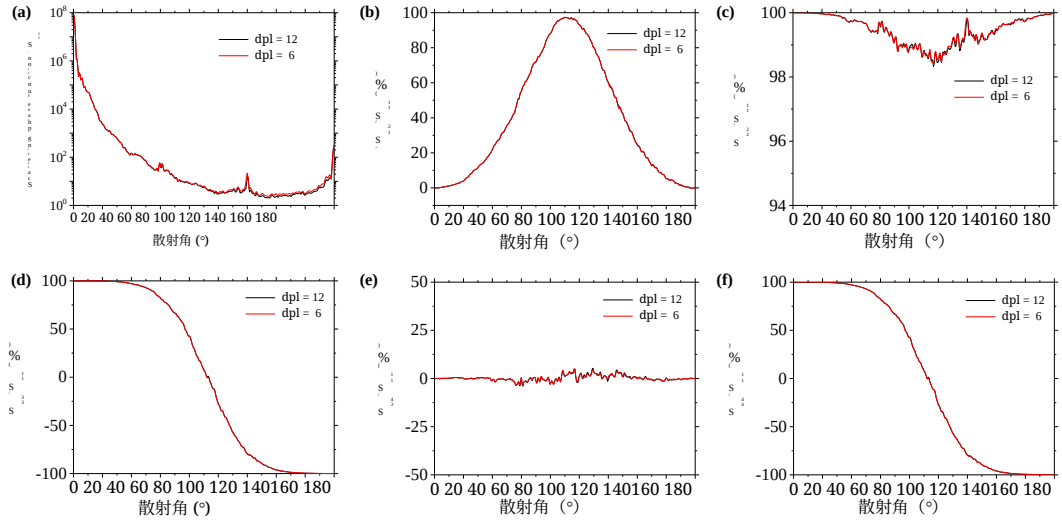


图4 dpl值对应的离散偶极子近似解收敛性验证。

3.4. 光学常数

微藻的主要代谢物组成包括蛋白质、碳水化合物和脂肪[45]。微藻的有效复光学常数可通过有效介质近似进行估算，例如麦克斯韦–加内特模型[46],和布鲁格曼方法[47]。微藻的实验折射率范围为1.004 至1.167，这是由于各组分的组成存在差异[19, 45, 48]。此外，可根据藻细胞中色素的浓度计算微藻虚部的吸收指数。先前研究表明，散射主要受聚集体与周围水介质之间光学常数实部差异的影响，而吸收则源于吸收指数[24, 26, 49]。因此，折射率的变化表明散射存在差异。

此外，正如实验和理论研究所观察到的，在可见光谱范围内，光学常数可近似视为与波长无关的常数[45, 48]。这表明折射率的微小差异

不会影响微藻散射特性的结论。此处选择了微藻的光谱相关光学常数 [19], ，以使计算结果与实验测量值相近。细胞周围非吸收性培养基的光谱光学常数可通过柯西色散关系[28]

$$n_\lambda = A_1 + \frac{A_2}{\lambda^2} + \frac{A_3}{\lambda^4} \tag{20}$$

其中，表达式中的常数为= ， = 2.61 × 10⁻³ μm²，A_1 = 1.3271 μm²，A_2 和 A_3 = 5 × 10⁻⁵ μm⁴。

图5显示了微藻细胞的光谱复折射率以及培养基的折射率。如图所示，微藻的折射率和吸收指数分别介于1.344至1.351和2.118 × 10⁻⁵ 至1.647 × 10⁻³之间。复光学常数虚部中的吸收峰对应微藻细胞中的活体内叶绿素a和叶绿素b[50]。叶绿素a导致的折射率小幅下降与吸收峰相对应，这可归因于振子共振 理论[37]。培养基的光谱光学常数从1.348单调下降至1.332。

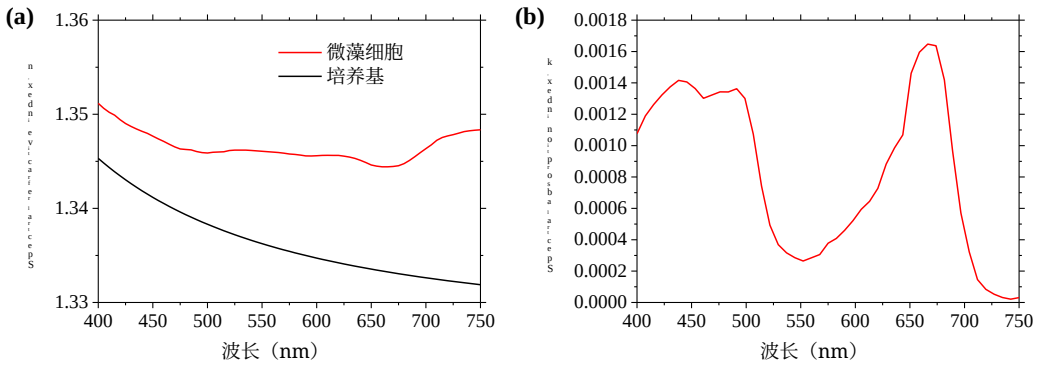


图 5 微藻细胞的光谱复折射率。

4. 结果与讨论

4.1. 散射元的尺寸和形状不变性

散射矩阵元素可用于涉及散射辐射偏振的应用，例如遥感和浮游植物识别。图 6 展示了使用离散偶极子近似法得到的球形、立方体和高斯球形团聚体的穆勒散射矩阵元素比随散射角的变化。对于每种形状的微藻聚集体，在 16.6 和 33.4 μm 尺寸下，预测得到的穆勒矩阵元素比相同。如图所示，所有形状和尺寸的穆勒矩阵元素比 $-S_{12}/S_{11}$, S_{33}/S_{11}, and S_{44}/S_{11} 均相同。藻类聚集体的线偏振度 $-S_{12}/S_{11}$ 在 90° 散射角时达到 1，在 0° 和 180° 散射角时等于 0。对于所有聚集体，穆勒矩阵元素比 S_{22}/S_{11}, and S_{34}/S_{11} 均趋近于，在整个散射角范围内分别约等于 1 和 0。当散射角从前向方向变为后向方向时，穆勒矩阵元素比 S_{33}/S_{11} 从 1 降至 -1，S_{44}/S_{11}的元素比也如此。图 6 中展示的微藻聚集体的不同穆勒矩阵元素比与单个球体的相似 [51]。此外，多细胞丝状蓝藻聚集体的穆勒矩阵元素比中没有出现共振峰。这些结果与 Mackowski 和 Mishchenko [52], 发现的结果一致；他们指出，聚集体会导致矩阵元素中的振荡阻尼。振荡消失也归因于聚集体的取向平均。 此外，S_{22}/S_{11} 比值偏离了

单Mishchenko 等人也观察到了这种现象。[53], 可用于表征聚集体的非球形性。

S_{11} 元素在前向散射角处表现出显著差异，且这种差异随着聚集体尺寸增大而增大[54] （参见补充材料）。除S_{11}, 在前向方向上的增大外，散射矩阵元素可近似视为对微藻聚集体的形状和尺寸不变。

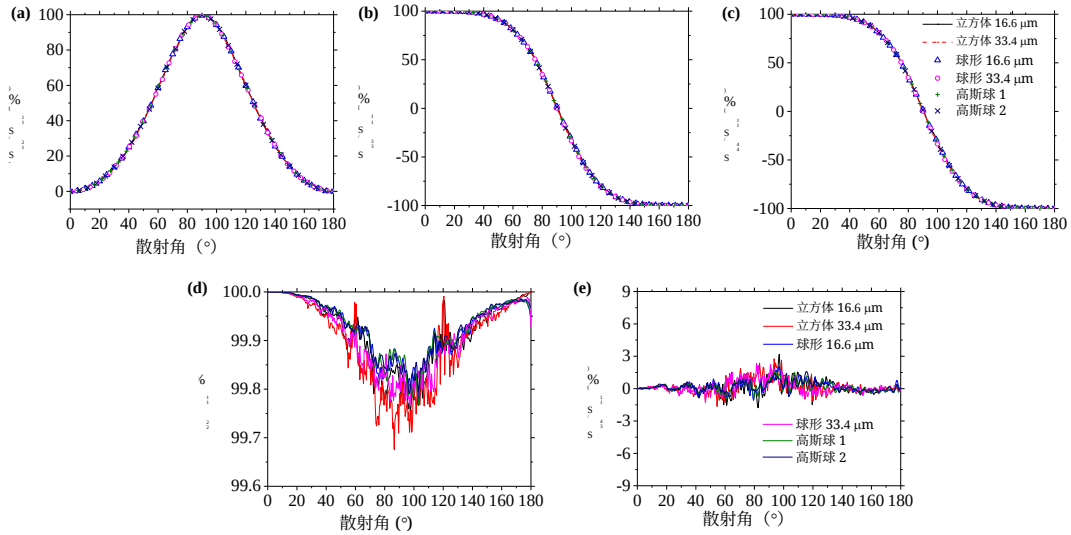


图 6 球形、立方体和高斯球形聚集体的散射矩阵元素 tes

针对不同尺寸。

4.2. 截面的尺寸和形状不变性

图 7 展示了尺寸分别为 16.6、33.4 和 66.5 μm 的微藻聚集体群落的单位体积 EACS。微藻聚集体的单位体积截面定义为截面除以细胞聚集体的体积。图 7(a) 表明，对于所有聚集体尺寸，消光截面均随着波长的增加而呈现上升趋势。不同聚集体尺寸的消光截面存在变化，然而，所有

变化范围为 0.08 至 0.18。尽管存在一些差异，消光截面仍表现出显著的相似性。吸收截面在 510 至 650 nm 和 680 至 750 nm 的光谱区域几乎重合，而在约 450 nm 的吸收峰处差异相对显著。截面参数的不重合意味着存在不可忽略的多重散射 [55]。与不同尺寸对应的吸收截面并不重合，表明吸收截面不再是纯粹的体积现象 [24, 25, 56]。这归因于聚集体尺寸较大，以及吸收指数中的吸收峰不再是简单数值。忽略部分细节时，微藻聚集体的 EACS 可视为近似尺寸不变。此外，微藻聚集体尺寸越大，吸收截面越小，这表明微藻聚集体尺寸的增加会降低光能利用效率。

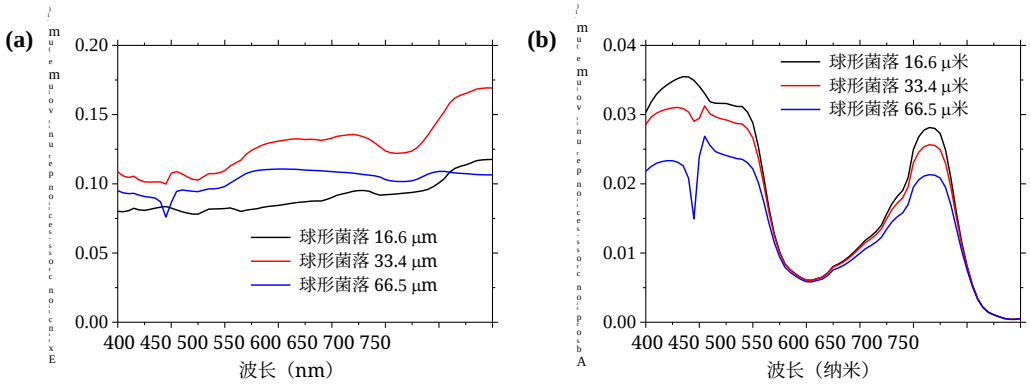


图 7 不同情况下微藻聚集体群落的单位体积截面

尺寸。

图 8 显示了不同形状（即球形、立方体形和高斯形）的微藻聚集体群落的单位体积 EACS。如图所示，

不同形状的消光截面变化趋势一致，且在光合有效辐射区域几乎重合。不同形状的吸收截面的吸收峰在光合有效辐射光谱区域完全对应且完美重合。这证实了作者此前报道的结果 [24, 25, 56],，即吸收是一种体积现象。因此，单位体积 EACS 与微藻聚集体的形状无关，我们将其称为 EACS 的形状不变性。这意味着无需考虑聚集体形状对截面散射特性的影响。

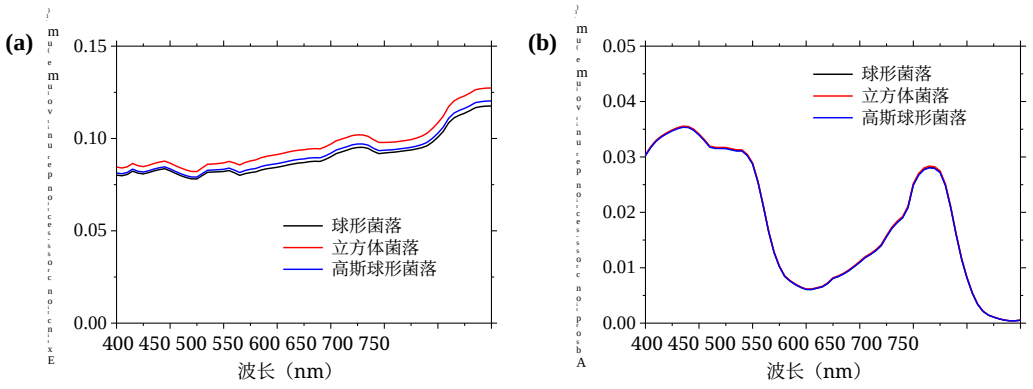


图 8 不同形状的微藻聚集体群落单位体积截面。 nt

形状。

图 9 展示了不同形状、等效体积的微藻聚集体群落的单位体积 EACS。结果显示，不同聚集体形状的消光截面变化趋势相似，但在光合有效辐射区域内并未重合。这可能是因为消光并非体积现象。尽管如此，不同形状下吸收截面的吸收峰完全对应，且在光合有效辐射光谱区域内几乎重合。因此，可以认为吸收截面独立于

微藻细胞的体积分布。这意味着，可以在体积现象假设下采用洛伦兹-米氏理论计算微藻聚集体的吸收截面。

总之，微藻聚集体单位体积的 EACS 具有形状不变性和近似的尺寸不变性。当聚集体尺寸足够大，且考虑吸收指数中的吸收峰时，吸收截面并非完全是一种体积现象。

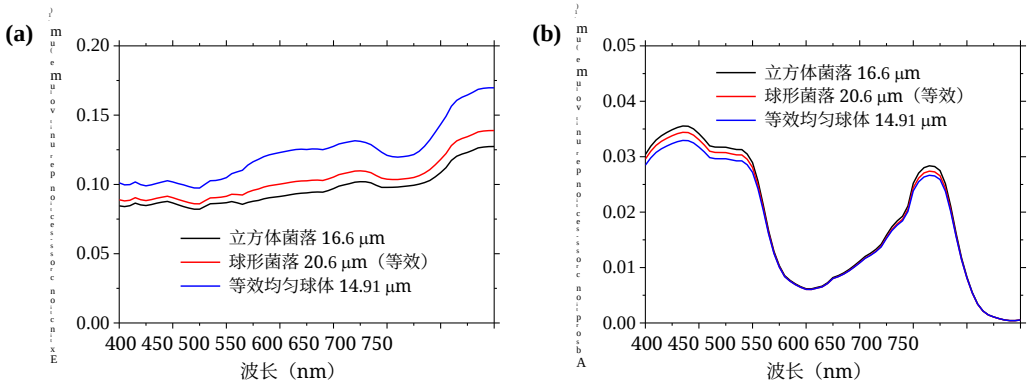


图9 等效的微藻聚集体群落单位体积截面

体积。

4.3. 散射矩阵元素的波长不变性

如图10所示，球形微藻聚集体群体的散射矩阵元素。本研究前一节已验证，穆勒矩阵元素比与聚集体的形状和尺寸无关。如图所示，除 S_{11}，外，散射矩阵元素比也几乎不随波长变化。然而，元素 S_{11} 与散射相函数（SPF）成正比，在微藻辐射传输研究中，该函数可以近似认为与波长无关 [57]。在光合有效辐射波长范围内，S_{11} 的主要差异在于前向散射。而微藻

不对称因子 据广泛报道约为 0。97 [13, 58]。

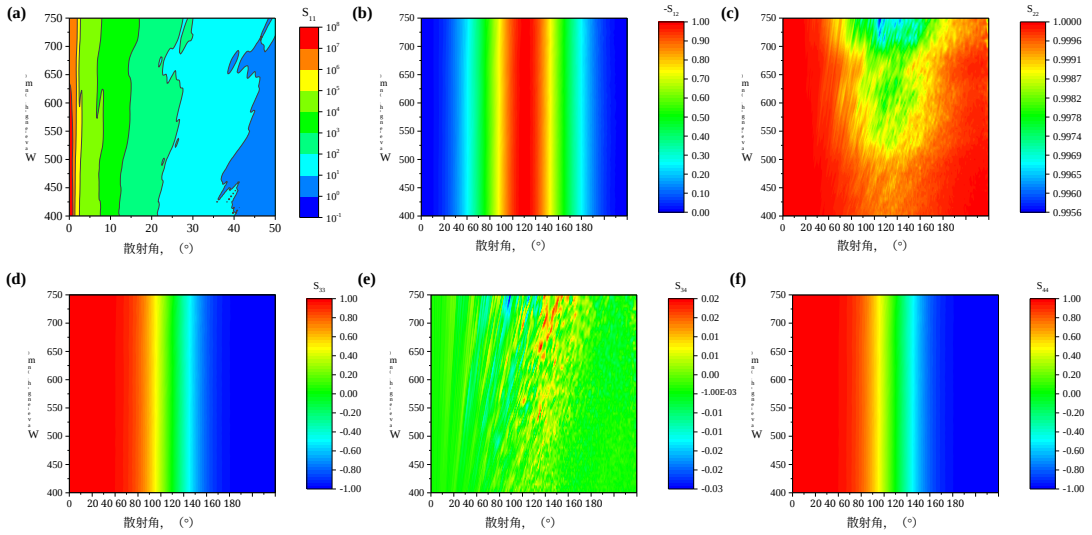


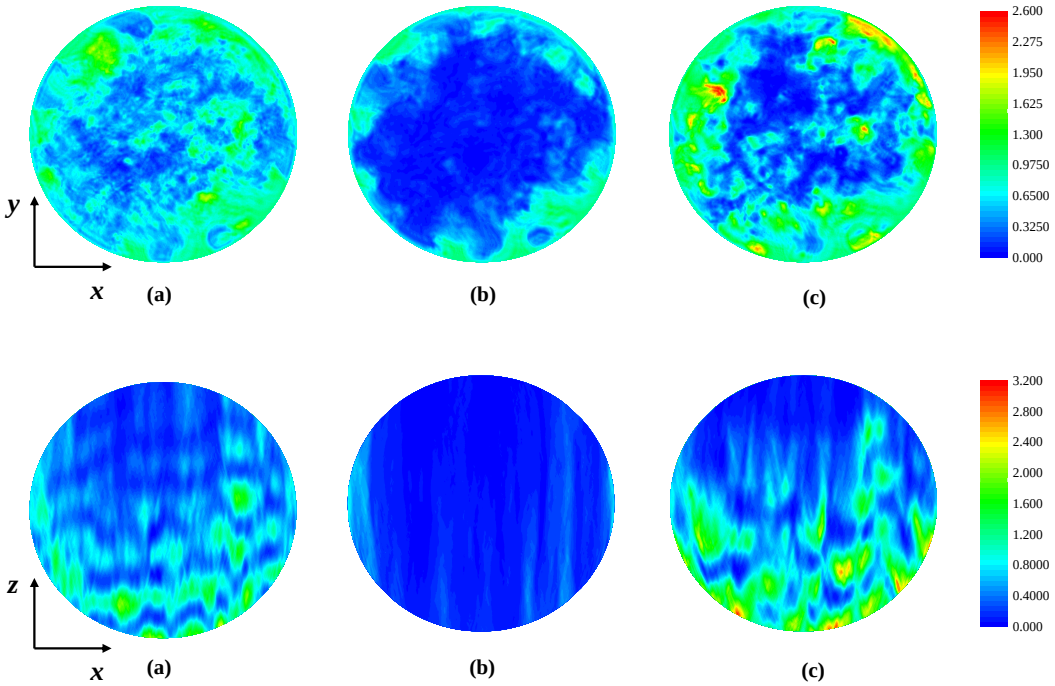
图10 微藻聚集体群落的穆勒矩阵元素。

此外，微藻悬浮液中的光散射可用 H-G相函数描述，以达到合理的精度 [59]。散射电磁场的 线偏振度 $-S_{12}/S_{11}$，呈向下开口的抛物线形，在前向和后向取向时均等于 0，并且在所有波长下，散射角为 90° 的方向上达到 100%。研究发现，在光合有效辐射光谱范围内（对应于尺寸参数），穆勒矩阵元素比 S_{22}/S_{11} 在所有散射角下均接近 100%。穆勒矩阵元素比 S_{34}/S_{11} 在所有散射角和波长下均可视为约等于零。此外，图10 (d) 和 (f) 中的主对角元素比在整个散射方向范围内从 1 变化到 -1，可视为在所有波长下均相同。这些结果与单个球体在所有波长下的结果相似，因此聚集体可视为方向无关。结合此前关于.....不变性的结论

散射矩阵元比相对于形状和尺寸而言，微藻聚集体的散射矩阵元比几乎不受形状、尺寸和波长的影响。

4.4. 微藻聚集体的内部电场

计算聚集体内部的电磁场，以便更好地理解和解释聚集体的吸收截面所呈现的非体积现象和较大的凹陷。图 11 显示了直径为 66.5 μm 的球形微藻聚集体群体在上方面板的 $z = 0$ 平面和下方面板的 $y = 0$ 平面上的总电场实值。输入参数为波长 440、445 和 450 nm 处的复折射率。如图所示，445 nm 处聚集体的内部电场与 440 nm 和 450 nm 处相比呈现出明显差异。在微藻聚集体的周边观察到了典型的干涉峰。对于 445 nm 处的电场，除表面附近外，内部场相对较弱，这导致吸收截面出现较大的凹陷。这可归因于吸收峰 [60] 周围电磁场的共振和非共振现象。所呈现的内部场结果证实了 440- 450 nm 光谱范围内的截面振荡结果，并解释了吸收截面在 440 和 450 nm 之间的快速下降和上升。



Fig。11 微藻聚集体群落的内部场，上图为 $z = 0$ 平面，以及

下方图面对应$y = 0$ 平面，入射线性偏振光沿z方向传播。

5. 结论

基于所呈现的结果， 本研究并未强调微藻聚集体的散射特性随尺寸、形状和波长的变化，而是探讨了散射特性不变性的可能性。蓝细菌聚集体的散射矩阵元比几乎不随形状、尺寸和波长变化。对于蓝细菌聚集体，单位体积的 EACS 具有形状不变性，并且近似具有尺寸不变性。而且，聚集体的吸收截面与微藻细胞的空间分布无关。此外，当聚集体超过一定尺寸时，吸收截面并不仅仅是一种体积现象。 对微藻聚集体散射特性的不变性解释使我们能够理解微藻聚集体的散射特性cuntegn

直观地看，蓝细菌聚集体。 微藻聚集体散射特性的形状不变性表明，藻类的聚集过程以及聚集体中藻细胞的运动不会影响细胞聚集体的光能利用。蓝细菌聚集体的散射特征对于量化光与光合微藻之间的相互作用至关重要。

资助

本研究得到江西省自然科学基金（编号：20212BAB214060）和国家留学基金管理委员会的资助，谨此致谢。

参考文献

[1] Jha D, Jain V, Sharma B, Kant A, Garlapati VK. 微藻基药品和营养保健品：一个具有巨大市场潜力的新兴领域。ChemBioEng Reviews. 2017年; 4:257-72.

[2] Yap JK、Sankaran R、Chew KW、Halimatul Munawaroh HS、Ho SH、Rajesh Banu J、Show PL。绿色技术的发展：微藻生物质潜在应用的综合综述。Chemosphere。2021年；281：130886。

[3] Pruvost J. 第26章——光生物反应器中藻类的培养及生物柴油生产。载于：Pandey A、Larroche C、Dussap CG、Gnansounou E、Khanal SK、Ricke S，编。生物燃料：用于液态和气态生物燃料生产的替代原料与转化过程（第二版）：学术出版社；2019年。

[4] Revellame ED, Aguda R, Chistoserdov A, Fortela DL, Hernandez RA, Zappi ME. 太空探索中的微藻培养：评估新一代废弃物转化为人类生命支持系统在长期太空旅行和行星人类居住中的潜力。藻类研究. 2021年; 55:102258.

[5] Yang JH, Zhao T, Cui XY, Peng MB, Wang XT, Mao HM, Cui MS. 从培养到利用，深入认识微藻的碳中和：关于藻类固体生物燃料的批判性综述。生物质与生物能源. 2022年;166:106599.

[6] Yan N, Zhou K, Tong YW, Leong DT, Dickieson MP. 通过“绿色化学农业”从CO_2获取食物的途径。自然·可持续性. 2022年;5:907-9.

[7] Gifuni I、Pollio A、Safi C、Marzocchella A、Olivieri G。微藻生物炼制当前的瓶颈与挑战。生物技术趋势。2019年；37：242-52。[8] Hoeniges J、Welch W、Pruvost J、Pilon L。用于提高生物质生产率的新型外部反射式跑道池设计。藻类研究。2022年；65：102742。[9] Pruvost J、Cornet JF、Le Borgne F、Goetz V、Legrand J。太阳能光生物反应器生产中光照变化条件下微藻培养的理论研究及其与蓝细菌的比较。藻类研究。2015年；10：87-99。[10] Galanakis CM。微藻：培养、化合物回收与应用：学术出版社；2020年。[11] Muñoz R、Gonzalez-Fernandez C。基于微藻的生物燃料和生物产品：从原料培养到最终产品：伍德海德出版社；2017年。[12] Berberoglu H、Pilon L。辐射特性的实验测量

Anabaena variabilis ATCC 29413-U 和 Rhodobacter sphaeroides ATCC 49419。International Journal of Hydrogen Energy。2007年；32：4772-85。

[13] Berberoglu H、Gomez PS、Pilon L。用于 CO_2 固定和生物燃料生产的 Botryococcus braunii、Chlorococcum littorale 和 Chlorella sp. 的辐射特性。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2009年；110：1879-93。

[14] Berberoglu H, Pilon L, Melis A. 莱茵衣藻 CC125及其叶绿素天线截短转化体 tla1、tlaX 和 tla1-CW+。International Journal of Hydrogen Energy。2008年；33：6467-83。

[15] Heng R-L, Pilon L. Nannochloropsis oculata 分批培养过程中的时变辐射特性。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2014年;144:154-63。

[16] Ma CY、Zhao JM、Liu LH。Spirulina platensis生长依赖性辐射特性时间尺度变化特征的实验研究。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2018年；217：453-8。

[17] Ma CY, Zhao JM, Liu LH, Zhang L。《Chlorella vulgaris》的生长依赖性辐射特性及其对光生物反应器中光通量率预测的影响。Journal of Applied Phycology。2019年；31：235-47。

[18] Zhao JM, Ma CY, Liu LH. 微藻生长依赖性光学性质的时间尺度变化。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2018年; 214:61-70.

[19] Lee E, Heng R-L, Pilon L. 选定的光合

用于生产生物燃料的微藻。《定量光谱学与辐射传递杂志》。2013;114:122-35。

[20] Pottier L, Pruvost J, Deremetz J, Cornet JF, Legrand J, Dussap CG. 环形光生物反应器中莱茵衣藻一维光衰减的完全预测模型。《生物技术与生物工程》。2005年;91:569-82。

[21] Dauchet J, Blanco S, Cornet JF, Fournier R. 光合微生物辐射特性的计算。《定量光谱学与辐射传输杂志》。2015年；161：60-84。

[22] Dong J, Zhao JM, Liu LH. 刺状表面结构对微生物辐射特性的影响。《定量光谱学与辐射传输杂志》。2016年；173：49-64。

[23] Bhowmik A, Pilon L. 球形真核微藻细胞可以被视为光学均匀的吗? Journal of the Optical Society of America A. 2016年;33:1495- 503.

[24] Heng RL、Sy KC、Pilon L. 双球体、四球体、球体圆环及其等效包覆球体的吸收与散射。Journal of the Optical Society of America A 光学、图像科学与视觉。2015年；32：46-60。

[25] Kandilian R、Heng RL、Pilon L. 分形聚集体及其等效包覆球体的吸收与散射。Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer。2015年；151：310-26。

[26] Lee E, Pilon L. 长且随机取向的球体线性链的吸收和散射。Journal of the Optical Society of America A。2013;30:1892-900.

[27] Ma CY, Zhao JM, Liu LH. 原核多细胞蓝藻辐射特性的理论分析. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2019年; 224:91-102.

[28] Hoeniges J、Kandilian R、Zhang C、Pruvost J、Legrand J、Grizeau D 等。群体形成对 Botryococcus braunii 光吸收的影响。藻类研究。2020年；50：101985。

[29] Harris EH。《衣藻资料手册：衣藻及其实验室应用简介》：学术出版社；2009年。

[30] Ratcliff WC, Herron MD, Howell K, Pentz JT, Rosenzweig F, Travisano M. 莱茵衣藻单细胞与多细胞交替生活史的实验进化。自然·通讯。2013;4:2742。

[31] Brennan L, Owende P. 微藻生物燃料——生物燃料及联产品生产、加工与提取技术综述。可再生与可持续能源评论。2010;14:557-77。

[32] Souliès A、Pruvost J、Legrand J、Castelain C、Burghelea TI。不同体积分数下绿微藻 Chlorella vulgaris 悬浮液的流变特性。流变学学报。2013年；52：589-605。

[33] Altendorf H、Jeulin D。基于随机游走的随机建模在三维纤维系统中的应用。物理评论E。2011年；83：041804。

[34] Schladitz K, Peters S, Reinel-Bitzer D, Wiegmann A, Ohser J。基于几何建模和流动模拟的非织造材料声学内饰设计。计算材料科学。2006；38：56-66。

[35] Nousiainen T, McFarquhar GM. 准球形冰晶的光散射。大气科学杂志。2004;61:2229-48。

[36] Muinonen K, Zubko E, Tyynelä J, Shkuratov YG, Videen G. 采用离散偶极子近似的高斯随机粒子光散射。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2007年；106:360-77。

[37] Bohren CF, Huffman DR. 小颗粒对光的吸收和散射：约翰·威立父子公司；2008年。

[38] Manickavasagam S, Mengüç MP. 涂层无限长圆柱体的散射矩阵元素。《应用光学》。1998;37:2473-82。

[39] Muinonen K, Pieniluoma T. 高斯随机椭球粒子的光散射：采用离散偶极子近似的初步结果。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2011年；112:1747-52。

[40] Yurkin MA、Hoekstra AG。离散偶极近似：综述与最新进展。《定量光谱学与辐射传输杂志》。2007年；106：558-89。

[41] Draine BT, Flatau PJ. 用于散射计算的离散偶极子近似。Journal of the Optical Society of America A. 1994;11:1491-9.

[42] Yurkin MA, Hoekstra AG. 离散偶极子近似代码 ADDA：功能与已知局限性。Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2011年; 112:2234-47.

[43] Yurkin MA, Maltsev VP, Hoekstra AG. 用离散偶极近似模拟远大于波长的颗粒的光散射。Journal of

Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2007年;106:546-57。[44] Inzhevatkin KG, Yurkin MA. 低折射率反差散射体内部场的均匀尺寸近似。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2022年;277:107965。[45] Aas E. 根据浮游植物的代谢物组成推导其折射率。Journal of Plankton Research. 1996年;18:2223-49。[46] Mallet P, Gu, Eacute CA, Sentenac A. 存在多重散射时的麦克斯韦–加内特混合规则：推导与准确性。Physical Review B. 2005年;72:014205。[47] Sihvola A. 复介电系数混合规则。Subsurface Sensing Technologies & Applications. 2000年;1:393-415。

[48] Jonasz M、Fournier GR. 水中颗粒的光散射：学术出版社；2011年。

[49] Gordon HR. 随机取向圆柱体的光散射和吸收：适用于海洋颗粒的折射率下对长径比的依赖性。Opt Express. 2011年；19：4673-91。

[50] Bidigare RR, Ondrusek ME, Morrow JH, Kiefer DA. 藻类色素的体内吸收特性。International Society for Optics and Photonics. 1990年;1302:290-303.[51] Liu L, Mishchenko MI. 聚集对烟炱气溶胶散射和辐射特性的影响。Journal of Geophysical Research: Atmospheres. 2005年;110.[52] Mackowski DW, Mishchenko MI. 球体集合的T矩阵和散射矩阵计算。Journal of the Optical Society of America A. 1996年;13:2266-78.

[53] Mishchenko MI，Mackowski DW，Travis LD. 接触和分离双球体的光散射。《应用光学》。1995年；34：4589-99。[54] Manickavasagam S，Mengüç MP. 类分形烟炱团聚体的散射矩阵元素。《应用光学》。1997年；36：1337-51。[55] Yon J，Liu FS，Bescond A，Caumont-Prim C，Rozé C，Ouf FX，等. 多重散射对烟炱分形团聚体辐射特性的影响。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。2014年；133：374-81。[56] Drolen BL，Tien CL. 团聚烟炱颗粒的吸收和散射。Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer。1987年；37：433-48。[57] Pilon L，Kandilian R. 第二章——光与光合微生物的相互作用。载于：Legrand J，编者。《化学工程进展》：学术出版社；2016年。第107-49页。[58] Pilon L，Berberoğlu H，Kandilian R. 微藻光生物固碳与燃料生产中的辐射传递。Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer。2011年；112：2639-60。[59] Berberoglu H，Yin J，Pilon L. 用于 H_2 生产和 CO_2 减排的鼓泡式光生物反应器中的光传递。International Journal of Hydrogen Energy。2007年；32：2273-85。[60] Mishchenko MI，Hovenier JW，Travis LD. 非球形颗粒的光散射：理论、测量与应用。纽约：学术出版社；1999年。