

姜慧琪,于沛涵,胡振,等.A<sup>2</sup>O 污水生物处理过程中 DOM 对 N<sub>2</sub>O 生成的影响 [J]. 中国环境科学, 2025,45(4):1869-1877.

Jiang H Q, Yu P H, Hu Z, et al. Effect of dissolved organic matter on N<sub>2</sub>O generation in A<sup>2</sup>O biological wastewater treatment process [J]. China Environmental Science, 2025,45(4):1869-1877.

## A<sup>2</sup>O 污水生物处理过程中 DOM 对 N<sub>2</sub>O 生成的影响

姜慧琪<sup>1</sup>,于沛涵<sup>1</sup>,胡振<sup>1\*</sup>,任延刚<sup>2,3</sup>,郝泽育<sup>1</sup>,韩珂<sup>1</sup>,薛晨阳<sup>3</sup>,王金鹤<sup>4</sup> (1.山东大学环境科学与工程学院,山东青岛 266237; 2.中国科学院大学,北京 100049; 3.中国科学院生态环境科学研究中心,北京 100085; 4.山东建筑大学市政与环境工程学院,山东济南 250101)

**摘要:** 采用三维荧光-平行因子法(3D EEMs-PARAFAC)解析了厌氧-缺氧-好氧(A<sup>2</sup>O)污水生物处理过程中 DOM 特征,并对各工艺单元生成的 N<sub>2</sub>O 进行了定量分析,之后运用机器学习模型对二者的变化关系进行了响应预测.结果表明,污水处理厂进水中 DOM 主要包含类色氨酸 C1,类富里酸 C2,类腐殖酸 C3 和类酪氨酸 C4 四种组分,并以 C1 和 C4 为主,且各组分含量沿污水处理流程逐渐降低,易生物降解的 C1 和 C4 的去除速率明显高于 C2 和 C3. N<sub>2</sub>O 排放是直接碳排放的主要组成部分,其变化表现出明显的空间异质性,各处理单元 N<sub>2</sub>O 生成总量由高到低依次为好氧池、辐流沉淀池、缺氧池、厌氧池、细格栅、钟式沉砂池. Shapley Additive exPlanation(SHAP)分析表明,C1 和 C2 对 N<sub>2</sub>O 生成影响较大,而 C3 和 C4 几乎没有影响,其中 C1 对 N<sub>2</sub>O 的生成表现出促进作用,C2 则不利于 N<sub>2</sub>O 的生成.高通量测序结果表明,能够利用易生物降解有机物进行反硝化的 *Methylobacter* 和 *Terrimonas* 是污水处理厂内的优势菌属.本研究揭示了 A<sup>2</sup>O 污水生物处理过程中 N<sub>2</sub>O 生成对不同 DOM 组分的差异性响应,并为完善当前污水处理厂的碳排放核算方法并优化污水处理厂低碳运行工艺提供了理论支撑.

**关键词:** 污水处理厂; 氧化亚氮; 溶解性有机物; 厌氧-缺氧-好氧; 碳排放

中图分类号: X703 文献标识码: A 文章编号: 1000-6923(2025)04-1869-09

**Effect of dissolved organic matter on N<sub>2</sub>O generation in A<sup>2</sup>O biological wastewater treatment process.** JIANG Hui-qi<sup>1</sup>, YU Pei-han<sup>1</sup>, HU Zhen<sup>1\*</sup>, REN Yan-gang<sup>2,3</sup>, HAO Ze-yu<sup>1</sup>, HAN Ke<sup>1</sup>, XUE Chen-yang<sup>3</sup>, WANG Jin-he<sup>4</sup> (1.School of Environmental Science and Engineering, Shandong University, Qingdao 266237, China; 2.University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3.Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China; 4.School of Municipal and Environmental Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China). *China Environmental Science*, 2025,45(4): 1869-1877

**Abstract:** In this study, the components of dissolved organic matter (DOM) during the anaerobic-anoxic-aerobic (A<sup>2</sup>O) biological wastewater treatment process was analyzed by using fluorescence emission excitation matrix combined with parallel factor analysis (3D EEMs-PARAFAC), and the generation of nitrous oxide (N<sub>2</sub>O) in each unit was also quantified. Additionally, machine learning model was employed to further predict the response relationship between DOM components and N<sub>2</sub>O generation. Results showed that DOM in the influent of the wastewater treatment plants (WWTP) was primarily composed of four components, including tryptophan (C1), fulvic acid (C2), humic acid (C3), and tyrosine (C4), while C1 and C4 being the dominant components. The concentration of DOM decreased progressively throughout the treatment process, while the removal efficiency of readily biodegradable DOM (such as C1 and C4) were significantly higher than that of C2 and C3. N<sub>2</sub>O emission was the major component of direct carbon emissions and showed significant spatial heterogeneity. The N<sub>2</sub>O emission amount of each unit ranked from high to low were observed in the following order: oxalic tank, secondary sedimentation tank, anoxic tank, anaerobic tank, grille, and primary sedimentation tank. Shapley Additive exPlanation (SHAP) analysis revealed that C1 and C2 would significantly affect the N<sub>2</sub>O generation process, while the effects of C3 and C4 were negligible. Specifically, C1 would enhance N<sub>2</sub>O generation, while C2 had an adverse effect. High-throughput sequencing results indicated that *Methylobacter* and *Terrimonas*, which could utilize readily biodegradable organic matter for denitrification, were the dominant bacterial genera in the sludge of WWTP. Overall, this study revealed disparate response between N<sub>2</sub>O generation and different DOM components during the A<sup>2</sup>O process, which would help to improve the current carbon emission accounting method of WWTPs and provide theoretical support for optimizing their low-carbon operation processes.

收稿日期: 2024-10-23

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52170043);国家重点研发计划课题(2021YFC3200602)

\* 责任作者, 教授, huzhen885@sdu.edu.cn

**Key words:** wastewater treatment plant (WWTP); nitrous oxide ( $N_2O$ ); dissolved organic matter (DOM); anaerobic-anoxic-aerobic ( $A^2O$ ); carbon emission

研究表明,我国污水处理厂产生的二氧化碳( $CO_2$ )当量约 18.7t/a,占全社会碳排放总量的 1%~2%,污水处理厂已成为重要碳排放源<sup>[1]</sup>.生物处理是当前我国普遍采用的污水处理方法,其中超过 30%的污水处理厂采用厌氧-缺氧-好氧( $A^2O$ )工艺<sup>[2]</sup>. $A^2O$  工艺过程中产生的碳排放可分为间接碳排放和直接碳排放,前者为污水处理厂运行期间的各种能耗和药耗,后者主要是来自生物反应过程中的温室气体如甲烷( $CH_4$ ),氧化亚氮( $N_2O$ )的逸散.一般认为,间接碳排放是污水处理厂碳排放的主要贡献因子<sup>[3]</sup>.然而,研究表明<sup>[4]</sup>,全球范围内污水处理厂产生的直接碳排放量每年高达 650Gg  $CO_2$ -eq,与其能耗产生的间接碳排放量相当.因此,深入研究污水处理厂直接碳排放的产生机制并探索有效控制措施,对于全面实现污水处理厂的低碳运行至关重要.

作为生物脱氮过程中的副产物以及中间产物, $N_2O$  的全球变暖潜在在百年时间尺度是  $CO_2$  的 273 倍,其对污水处理过程所造成温室效应贡献可达 80%以上<sup>[5]</sup>.因此,探索污水生物处理过程中  $N_2O$  产生机制及其影响因素对降低污水处理厂直接碳排放具有重要意义.一般认为,污水生物处理过程中生成的  $N_2O$  主要来源于生物脱氮时发生的各类反硝化过程<sup>[6]</sup>.除某些特定细菌因缺失氧化亚氮还原酶(Nos),导致其反硝化作用的最终产物是  $N_2O$  而非  $N_2$  外,我国污水处理厂普遍存在进水碳氮比(C/N)偏低的问题,碳源不足往往导致 Nos 受抑制,使得中间产物  $N_2O$  不能进一步被还原为氮气( $N_2$ ),是反硝化作用中  $N_2O$  大量积累的主要原因<sup>[7]</sup>.因此,碳源作为微生物的能量来源以及反硝化过程的电子供体,能够直接影响  $N_2O$  的生成.

在生物降解过程中,各种有机碳必须首先解聚并溶解在水中形成溶解性有机碳(DOC),才能被微生物分解利用<sup>[8]</sup>.污水处理厂中化学需氧量(COD)的 78.1%~86.5%由溶解性有机物(DOM)构成,它们作为微生物的电子供体和营养源与微生物的生长和代谢过程有着密切联系<sup>[9]</sup>.在水体流动过程中 DOM 会不断发生光化学降解和微生物降解,改变水体溶解氧水平和氧化还原电位,影响  $N_2O$  的生成<sup>[10]</sup>.自然

生态系统中,DOM 与  $N_2O$  生成存在显著关联.通过应用机器学习构建预测模型,有研究证明了河流生态系统中 DOM 浓度与  $N_2O$  排放通量间存在正相关性<sup>[11]</sup>.同时,溶解态  $N_2O$  浓度还与水体中 DOM 的组成密切相关,河流水体中易降解的蛋白质类 DOM 能够促进  $N_2O$  的产生释放<sup>[12]</sup>,稻田中腐殖质类难降解的 DOM 组分与  $N_2O$  的排放呈负相关关系<sup>[13]</sup>.类似的,污水生物处理工艺内部存在不同的微环境和多样的微生物代谢机制,常伴随 DOM 组分含量以及  $N_2O$  生成量的变化.然而,目前有关污水生物处理过程中 DOM 与  $N_2O$  的沿程变化特征以及两者间的响应关系尚缺乏深入解析.

因此,本研究选取了以  $A^2O$  为主体工艺的实际城市污水处理厂为研究对象,分析了工艺沿程 DOM 的迁移转化规律以及  $N_2O$  生成特征,并结合机器学习模型量化了 DOM 各组分对  $N_2O$  生成的影响;同时结合微生物群落结构特征分析,初步探讨了 DOM 影响  $N_2O$  生成的微生物作用机制,为今后污水处理厂低碳运行相关工艺的优化提供了理论基础.

## 1 材料与方法

### 1.1 处理工艺和采样点

本研究所选污水处理厂位于山东省济南市,采用  $A^2O$  工艺,处理能力为 200000m<sup>3</sup>/d.进水组成主要是城市生活污水和小部分工业废水,进水中 COD, BOD<sub>5</sub>, TN 分别为 400, 150, 40mg/L.设计出水水质达《城镇污水处理厂污染物排放标准》(GB18918-2002)一级 A 标准.

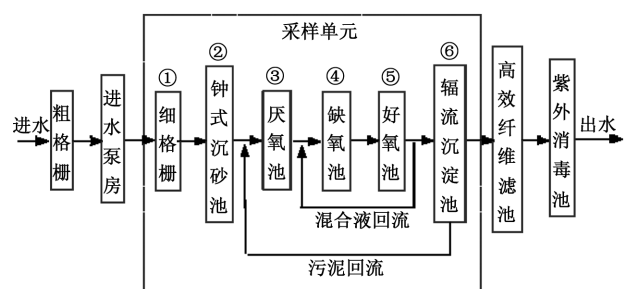


图 1 污水处理工艺流程及采样点布设位置

Fig. 1 Flow chart of wastewater treatment process and the location of different sampling points

为研究污水处理过程中 DOM 转化及 N<sub>2</sub>O 生成规律,根据处理工艺功能区的划分,通过在系统沿程布点,于细格栅、钟式沉砂池、A<sup>2</sup>O 生物反应池、辐流沉淀池各单元反应区分别布设采样点.具体工艺流程及采样点布设位置见图 1.

## 1.2 采样和分析方法

### 1.2.1 水样采集分析

于各采样点用氟化聚乙烯采样桶盛装采集污水水样并取 3 份平行样品,采集后的样品经过 0.45 μm 醋酸纤维滤膜过滤,于 48h 内使用国家标准方法<sup>[14]</sup>对样品中的氨氮(NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-N),硝态氮(NO<sub>3</sub><sup>-</sup>-N),亚硝态氮(NO<sub>2</sub><sup>-</sup>-N),总氮(TN)和混合液挥发性悬浮固体浓度(MLVSS)进行测定.使用总有机碳分析仪(TOC-L, Shimadzu, Japan)测定水体溶解性有机碳(DOC)浓度,使用荧光分光光度计(F-4700,Hitachi,Japan)测定 DOM 的荧光激发发射矩阵(EEM).

### 1.2.2 气样采集分析

于每日 8:00,12:00,15:00,18:00 在采样单元使用漂浮型气体通量箱进行气样采集(每 2min 采集一次,共采集 3 次),零气流量为 15L/min,覆水面积为 0.08m<sup>2</sup>,通过取样口用气体采样袋收集.气体中的 N<sub>2</sub>O(CH<sub>4</sub>)浓度通过气相色谱仪(7890B,Agilent,USA)测定.N<sub>2</sub>O(CH<sub>4</sub>)的释放通量计算公式如下:

$$F = \frac{C \times F_{\text{flush}} \times M \times P \times T_0}{22.4 \times S \times P_0 \times T} \quad (0)$$

式中: $F$  为 N<sub>2</sub>O(CH<sub>4</sub>)释放通量,μg/(m<sup>2</sup>·min); $C$  为 N<sub>2</sub>O(CH<sub>4</sub>)浓度,10<sup>-6</sup>;  $F_{\text{flush}}$  为载气流速,L/min; $M$  为 N<sub>2</sub>O(CH<sub>4</sub>)的摩尔质量,g/mol; $P$  为采样时的大气压,kPa; $T_0$  为标准热力学温度,273K;22.4 为气体标况摩尔体积常数,L/mol; $S$  为通量箱覆水面积,m<sup>2</sup>; $p_0$  为标准大气压,101kPa; $T$  为采样时的环境温度,K.

在采集气体通量样品的同时,利用上部空间法对污水中的溶解态 N<sub>2</sub>O 进行采集测定<sup>[15]</sup>.结合各单元尺寸参数,将单元内 N<sub>2</sub>O 释放量(mg)与 N<sub>2</sub>O 溶解量(mg)求和得到该单元 N<sub>2</sub>O 生成总量(mg).

### 1.2.3 微生物分析

从好氧池末端采集泥水混合样,使用冷冻离心机(5430R,Eppendorf,Germany)在转速为 5000r/min,温度为 4℃的条件下进行泥水分离获得底泥样品,将样本送往北京诺禾致源科技股份有限公司对微生物 V3-V4 区域的 16S rRNA 基因进行扩增和分析,并基于 Illumina NovaSeq PE250 平

台进行高通量测序.微生物 16S rRNA 基因序列已提交至 NCBI 数据库中,登录号为 PRJNA1194736.

## 1.3 系统碳排放核算

本研究基于排放因子法,参照《IPCC 国家温室气体清单指南》和《城镇污水处理厂污染物去除协同控制温室气体核算技术指南(试行)》提供的参数数据及核算方法,开展厂内碳排放核算.核算边界为厂内各污水处理单元,核算的碳排放类型有直接碳排放和间接碳排放,前者包括去除 COD 产生的碳排放,去除 TN 产生的碳排放以及外加碳源氧化产生的碳排放,后者包括电力消耗产生的碳排放和药剂消耗产生的碳排放.

CH<sub>4</sub>和 N<sub>2</sub>O 排放因子均通过实测数据计算所得;电力排放因子数据来源于生态环境部环境规划院发布的《中国区域电网二氧化碳排放因子研究(2023)》;其余污水厂的实际运行基础数据见表 1.

表 1 碳排放核算基础数据

Table 1 Basic data of carbon emission accounting

运行参数	数值
年处理水量(m <sup>3</sup> /a)	7.3×10 <sup>7</sup>
进水 COD(TN)平均浓度(mg/L)	400(40)
出水 COD(TN)平均浓度(mg/L)	16(10)
碳源消耗量(t/10kt 水)	1
药剂消耗量(t/10kt 水)	0.50
耗电量(MW·h/a)	34200

## 1.4 机器学习模型构建

为进一步量化 DOM 各组分对 N<sub>2</sub>O 生成的贡献,本文采用极限梯度提升(XGBoost)模型和 Shapley Additive exPlanation (SHAP)算法对所采集的数据进行预测分析.XGBoost 是一种基于梯度提升决策的改进算法,它可以高效地构建提升树,并解决分类和回归问题<sup>[16]</sup>.图 2 为 XGBoost 的算法流程示意图,所输入的数据集为 DOM 组分相对比例及单位生物 N<sub>2</sub>O 生成量,其中分为 80% 测试集 20%训练集.在模型评估阶段,选择均方根误差 RMSE 和 R<sup>2</sup> 分数作为模型预测效果的评估指标<sup>[17]</sup>.表 2 展示了本研究中相关的 XGBoost 参数.SHAP 用于解释模型的输出,使用博弈论中的 Shapley 值来解释模型的每个预测,同时提供了一种方法来理解模型的每个特征对个别预测结果的贡献大小<sup>[16]</sup>.在本研究中,通过 Summary Plot 概

要图表征各特征值的高低情况以及每个特征的正负贡献情况。

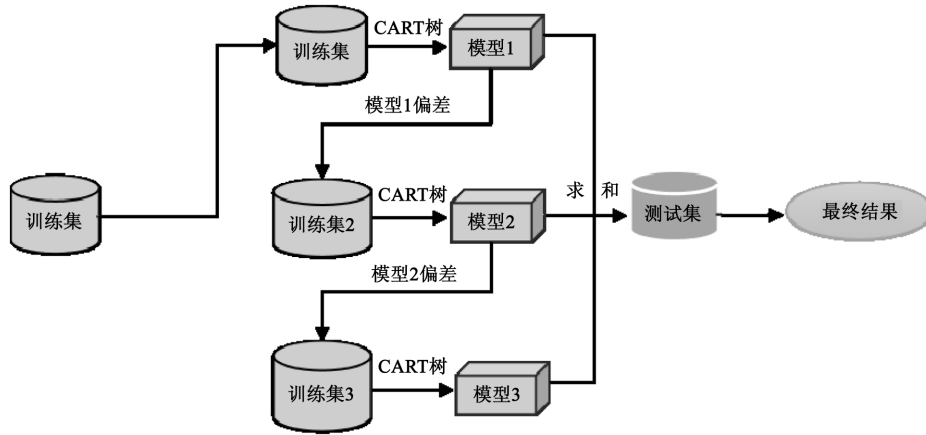


图2 XGBoost 算法流程示意  
Fig.2 Schematic diagram of the XGBoost

表2 XGBoost 参数  
Table 2 Parameters of XGBoost

参数	数值
learning rate	0.3
max depth	6
min child weight	1
subsample	1.0
colsample bytree	1.0
n estimators	100
RMSE	5.86
$R^2$	0.91

### 1.5 数据分析

使用微软 Office Excel 2021 对原始数据进行处理,机器学习模型由 Python 完成,利用 Matlab R2023b 对 EEM 数据进行平行因子分析,其余绘图均由 Origin 2024 完成。

## 2 结果与讨论

### 2.1 沿程 DOM 变化特征

采用 PARAFAC 模型方法对 EEM 样本数据进行分析,共解析出了 4 种荧光组分.其中组分 C1( $E_x/E_m=276/335\text{nm}$  和  $E_x/E_m=230/335$ )以及组分 C4( $E_x/E_m=220/332\text{nm}$ )为类色氨酸和类酪氨酸,属于蛋白质类荧光组分,具有较好的可生物降解性<sup>[18]</sup>.组分 C2( $E_x/E_m=317/387\text{nm}$  和  $E_x/E_m=237/387\text{nm}$ )和 C3 ( $E_x/E_m=256/446\text{nm}$  和  $E_x/E_m=363/446\text{nm}$ )为类富里酸和类腐殖酸,属于腐殖质类荧光组分,生物可利用性较差<sup>[18]</sup>.图 3 展示了污水处理厂沿程 DOC 浓度及 DOM 组分含量的变化情况.进入生化段后,DOC 浓

度呈现整体降低的趋势,表明生化段对 DOM 的削减起着关键作用.进水中的 DOM 组分主要为 C1 和 C4,两者占比之和为 80.9%.处理过程中,C1 和 C4 的去除率分别为 81.9%和 100%,而 C2 和 C3 的去除率仅为 20.4%和 49.8%.Yu 等<sup>[19]</sup>在对 A<sup>2</sup>O 污水处理厂中 DOM 进行表征的过程中同样发现,生物处理过程对色氨酸和酪氨酸表现出了较高去除率(58.78%~98.31%),而对腐殖质类物质的去除率仅在 10%以下.这主要是因为低分子量 DOM 组分很容易被微生物同化,而腐殖质类物质则更顽固<sup>[20]</sup>.

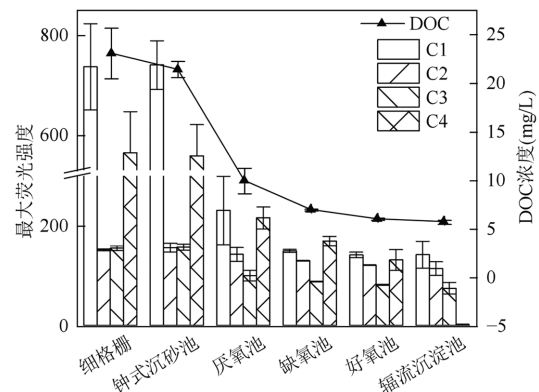


图3 污水处理厂沿程 DOC 浓度及 DOM 各组分  $F_{\max}$  变化  
Fig.3 Variation of DOC concentration and the  $F_{\max}$  of each DOM component throughout the WWTP

污水经过细格栅和钟式沉砂池后,DOM 各组分含量并未发生明显变化,说明物化处理单元对水中有机物的去除贡献较低.当污水进入厌氧池后,DOM 开始被活性污泥大量吸附降解,Tang 等<sup>[21]</sup>

在对 A<sup>2</sup>O 沿程 DOM 的变化研究中证实了厌氧处理环节在去除 DOM 过程中发挥着关键作用.易生物降解的 C1 和 C4 组分在厌氧池处荧光强度分别降低了 68.9%和 61.4%,说明微生物更倾向于首先利用其中易分解的不稳定物质<sup>[22]</sup>.由于 DOM 在厌氧阶段已被大量吸附降解,因此缺氧池处 DOM 各组分含量的下降相较变缓,荧光强度下降值均在 40%以下.好氧池和辐流沉淀池处 C4 组分含量有所下降,可能是相关反硝化菌消耗 C4 作为电子供体

进行了反硝化过程.

## 2.2 沿程 N<sub>2</sub>O 生成特征

污水处理厂碳排放核算结果显示,间接碳排放占污水厂总碳排放量的 66.44%,处于 Xi 等<sup>[23]</sup>统计研究的数值范围内,其中电耗以及药耗产生的间接碳排放分别在总碳排放中占比 53.95%和 12.49%.直接碳排放分别在总碳排放中占比 33.56%,N<sub>2</sub>O 是直接碳排放的主要组成部分,其在总碳排放中占比 11.44%,对总碳排放的贡献仅次于药耗.

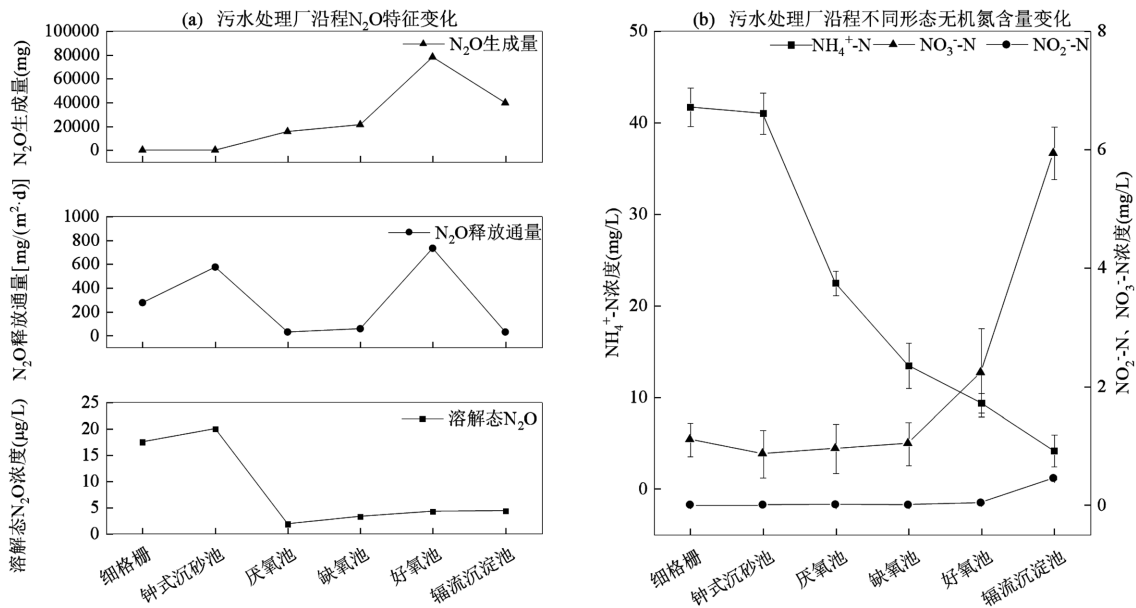


图 4 污水处理厂沿程 N<sub>2</sub>O 特征变化及不同形态无机氮含量变化

Fig.4 N<sub>2</sub>O generation characteristics and variation of inorganic nitrogen compounds concentrations throughout the WWTP

图 4(a)和图 4(b)分别展示了污水处理厂沿程 N<sub>2</sub>O 生成特征和水质中不同形态无机氮含量的变化.N<sub>2</sub>O 的生成表现出较大的空间异质性,各处理单元 N<sub>2</sub>O 生成总量由高到低依次为好氧池(78198.15mg)、辐流沉淀池(39827.59mg)、缺氧池(21302.34mg)、厌氧池(15495.58mg)、细格栅(31.79mg)、钟式沉砂池(8.13mg).细格栅和钟式沉砂池水体中的 DOM 和 NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-N 几乎没有变化,表明在物化处理阶段中未进行明显的生物脱氮过程,但观测到较高溶解态 N<sub>2</sub>O 浓度和 N<sub>2</sub>O 释放通量.排水管道中形成的特定微生物群落在降解有机物的过程中,会产生大量温室气体,进而对下游污水厂的碳排放产生重要影响<sup>[24]</sup>.因此污水管道中的微生物在进入污水处理厂之前可能进行了自然代谢活动,产生了一定量的 N<sub>2</sub>O 并溶解在水中,进入污水处理厂后,

污水中溶解的部分 N<sub>2</sub>O 由于水面迅速变宽阔以及水流扰动而释放出来<sup>[25]</sup>.厌氧池处由于污泥外回流的稀释作用,污泥吸附作用和微生物的降解,NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-N 浓度,C1 和 C4 组分均大量削减,并在该阶段观察到 N<sub>2</sub>O 总量明显的增长趋势,可能来源于反硝化过程 N<sub>2</sub>O 的产生和积累<sup>[26]</sup>.A<sup>2</sup>O 污水处理工艺中内回流携带的较多 NO<sub>3</sub><sup>-</sup>-N 在进入缺氧池后被反硝化菌迅速还原进行反硝化作用,因此在缺氧池处观察到较低 NO<sub>3</sub><sup>-</sup>-N 浓度(1.03mg/L)以及 C1 和 C4 组分含量的下降.由于污水流动过程中溶解态 N<sub>2</sub>O 的积累以及缺氧池反硝化过程生成 N<sub>2</sub>O,导致了缺氧池处 N<sub>2</sub>O 总量高于厌氧池.好氧单元 C4 组分含量的下降可能是源于好氧反硝化菌的消耗,同时由于溶解态 N<sub>2</sub>O 的沿程积累效应,导致该单元溶解态 N<sub>2</sub>O 浓度高于厌氧池和缺氧池,在剧烈的曝气作用下,溶解的

$N_2O$  从液面被吹脱至大气中,因此在该单元监测到了较高  $N_2O$  释放通量( $731.16\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{d})$ ).Sun 等人<sup>[27]</sup>在对全尺寸  $A^2O$  污水处理工艺沿程  $N_2O$  生成特征的研究中同样发现,在调研的所有污水处理单元中,好氧池处  $N_2O$  释放通量最高.DOM 和无机氮含量的变化表明辐流沉淀池有着良好的缺氧反硝化环境,由于该单元污泥停留时间较长,系统内仍有大量的微生物消耗 C4 进行反硝化作用产生  $N_2O$ <sup>[26]</sup>,导致该单元出现一定浓度的溶解态  $N_2O$  ( $4.34\mu\text{g}/\text{L}$ ),但由于水流相对平缓,并未观察到较多  $N_2O$  的释放.

### 2.3 $N_2O$ 生成与 DOM 组分动态变化的响应关系

由上述分析可知,DOM 降解与  $N_2O$  生成的核心单元均位于生化处理阶段,微生物在其中发挥着核心作用.为了消除各工艺单元由于运行条件不同造成的数据差异,明确单位污水中微生物利用 DOM 不同组分对  $N_2O$  生成的影响,基于训练好的 XGBoost 模型和 SHAP 算法,计算得到 DOM 各组分相对比例对单位生物  $N_2O$  生成量( $\text{mg } N_2O/\text{mg VSS}$ )的 SHAP 绝对平均值,如图 5(a)所示.DOM 组分对  $N_2O$  生成的影响程度各异,其中 C2 对  $N_2O$  的生成影响程度最大,可以认为是主要的预测因子,C1 影响程度次之,C3

和 C4 对  $N_2O$  的产生影响较小.图 5(b)SHAP 特征摘要图表明,随着 C1 相对比例的增大,其对  $N_2O$  生成的促进作用更为明显.C2 则表现出与 C1 相反的影响趋势,C2 的相对比例越高,越不利于  $N_2O$  的生成.C3 和 C4 对  $N_2O$  生成的影响较弱,不是预测  $N_2O$  生成的关键特征.该结果与先前的研究结果一致.Amaral 等<sup>[28]</sup>在探讨河口排放的温室气体与 DOM 组成间关系的过程中发现, $N_2O$  的产生与 DOM 中蛋白类物质密切相关,色氨酸组分会促进  $N_2O$  的生成.Barnes 等<sup>[29]</sup>发现蛋白质类荧光团与反硝化速率呈正相关关系,进而影响了反硝化过程中  $N_2O$  的生成.与蛋白类组分相比,腐殖质类组分属于稳定的难降解有机物,不容易被细菌群落作为碳源利用.有研究表明, $N_2O$  的累积排放量与 DOM 的可利用性呈显著正相关关系,且易降解的类色氨酸等物质会在微生物的作用下逐渐转化为难降解的类腐殖质组分<sup>[30-31]</sup>.因此,当水体 DOM 富含较多 C1 时,微生物代谢活动旺盛,更有利于反硝化作用的进行并产生  $N_2O$ .然而,随着 C1 的不断消耗,C2 的相对比例上升,此时由于缺乏易利用碳源,微生物的反硝化过程受到限制, $N_2O$  的生成随之减少.

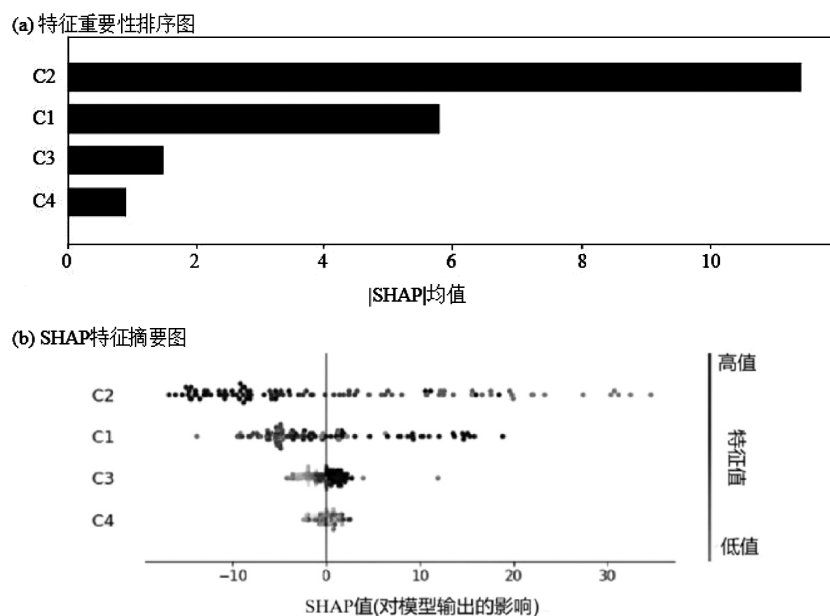


图5 特征重要性排序图及 SHAP 特征摘要图

Fig.5 Ranking chart of feature importance and SHAP feature summary plot

### 2.4 污水处理厂氮循环主要微生物群落特征

对污水处理厂活性污泥的微生物群落特征进行分析发现(图 6),门水平上,污水处理厂中优势菌门包

括变形菌门(Proteobacteria),拟杆菌门(Bacteroidota)和放线菌门(Actinobacteriota),其中变形菌门和拟杆菌门是反硝化的代表菌门.属水平上,主要优势菌属

包括甲基营养型反硝化菌属(*Methylothera*),硝化螺菌属(*Nitrospira*)和 *Terrimonas*。*Methylothera* 中的某些特定菌种已被证明具有反硝化能力<sup>[32]</sup>。*Nitrospira* 是亚硝酸盐氧化的主要细菌,广泛存在于与氮循环相关的自然和工程生态系统中<sup>[33]</sup>。*Terrimonas* 是典型的好氧异养反硝化菌<sup>[34]</sup>。从微生物群落的构成来看,与氮代谢相关的功能性菌群在污水处理厂中处于优势地位,表明该厂活性污泥具备良好的硝化和反硝化能力。

DOM 组成特征以及微生物群落结构共同对 N<sub>2</sub>O 的生成起着重要调控作用。在本研究中,检测到的优势菌属大多具有反硝化能力,且对环境碳底物非常敏感<sup>[32]</sup>,当有较多易降解碳源 C1 时,微生物代谢过程活跃,反硝化过程增强并生成更多 N<sub>2</sub>O<sup>[35]</sup>。而随着 C1 不断被利用转化,难降解组分 C2 占比不断升高,无法为反硝化细菌提供充足的电子供体,导致反硝化菌群之间的竞争加剧,进而限制了微生物反硝化过程的进行并导致 N<sub>2</sub>O 的大量生成。Ding

等<sup>[13]</sup>的研究支持了上述观点,DOM 组成特性可能通过影响微生物群落功能调节 N<sub>2</sub>O 生成,其中色氨酸类物质和富里酸类物质与 N<sub>2</sub>O 排放量分别呈正相关和负相关关系。

因此,本研究建议污水处理厂在选择外加碳源时,除考虑去除效率和运行成本外,应尽量降低易生物降解物质组分的相对比例,以减少直接碳排放。此外,目前在对污水处理厂进行碳排放核算的过程中,温室气体排放因子一般都是直接选取 IPCC 提供的建议值,该值的确定只是源于 N<sub>2</sub>O 排放对氮输入响应的简单线性假设<sup>[36]</sup>,忽略了对碳输入特别是碳源组分的响应。由于上述分析结果表明污水生物处理过程中 DOM 特征同样影响 N<sub>2</sub>O 的生成,因此建议把 DOM 组成特征值一并纳入对温室气体排放因子的计算中,并基于反应动力学机制构建 N<sub>2</sub>O 排放与 DOM 的时空动态关系模型,进而修正 IPCC 对 N<sub>2</sub>O 排放因子的建议值,从而提升碳排放核算结果的准确性。

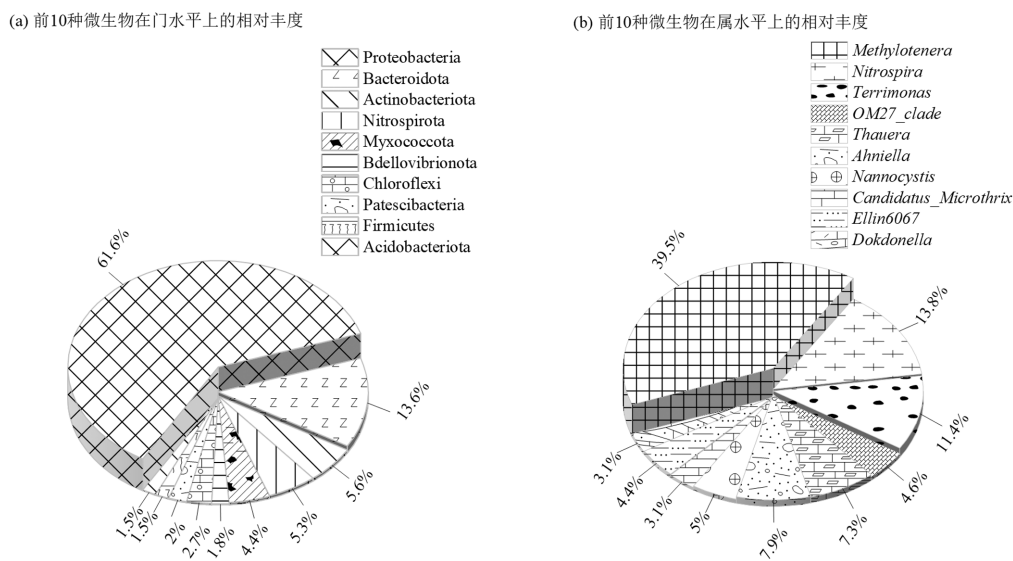


图6 前10种微生物在门和属水平上的相对丰度

Fig.6 Relative abundance of top 10 microorganisms at phylum and genus levels

### 3 结论

3.1 采用 3D EEMs-PARAFAC 方法解析了污水生物处理工艺沿程 DOM 变化特征,发现物化处理阶段对 DOM 几乎没有影响,DOM 各组分含量在进入生化段后逐渐降低;类色氨酸 C1 和类酪氨酸 C4 是水体 DOM 的主要组成,A<sup>2</sup>O 污水处理工艺对两者的去

除程度远大于类富里酸 C2 和类腐殖酸 C3。

3.2 碳排放核算结果表明,N<sub>2</sub>O 在直接碳排放中占比 11.44%,其对总碳排放的贡献仅次于药耗。污水处理厂内 N<sub>2</sub>O 的生成表现出较大的空间异质性,各处理单元 N<sub>2</sub>O 生成总量由高到低依次为好氧池、辐流沉淀池、缺氧池、厌氧池、细格栅、钟式沉砂池。

3.3 通过 SHAP 模型算法解析并量化了 DOM 各组

分对  $N_2O$  生成的影响贡献,发现 C2 对  $N_2O$  生成的影响程度最大,可以作为  $N_2O$  生成的主要影响预测因子,C1 次之,C3 和 C4 则对  $N_2O$  的生成几乎没有影响;其中 C1 对  $N_2O$  的生成具有促进作用,C2 则不利于  $N_2O$  的生成.高通量测序的结果表明,该污水处理厂内的优势菌属为 *Methylothermobacter*,*Nitrospira* 和 *Terrimonas*,其中 *Methylothermobacter* 和 *Terrimonas* 有利用易生物降解有机物进行反硝化的能力.

**3.4** 本研究揭示了  $A^2O$  污水处理工艺中  $N_2O$  生成对不同 DOM 组分的差异性响应.为减少直接碳排放,建议污水处理厂选择外加碳源时,在保障处理效率与经济成本的同时,应尽量降低易生物降解物质组分的相对比例.此外,建议将 DOM 纳入  $N_2O$  排放因子的计算中,以进一步提升碳排放核算结果准确性.

#### 参考文献:

- [1] Li Y, Gu H, Zhao G, et al. Carbon accounting of  $A^2O$  process based on carbon footprint in a full-scale municipal wastewater treatment plant [J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2023,55:104162.
- [2] 陈敏敏,刘杰,张震,等.中国城镇污水处理工艺的主要污染物去除效率分析 [J]. *环境污染与防治*, 2021,43(10):1321-1324,1328. Chen M M, Liu J, Zhang Z, et al. Analysis of removal efficiency of main pollutants in different municipal wastewater treatment processes of China [J]. *Environmental Pollution & Control*, 2021,43(10):1321-1324,1328.
- [3] 张海亚,李思琦,黎明月,等.城镇污水处理厂碳排放现状及减污降碳协同增效路径探讨 [J]. *环境工程技术学报*, 2023,13(6):2053-2062. Zhang H Y, Li S Q, Li M Y, et al. Carbon emission analysis of municipal wastewater treatment plants and discussion on synergistic path of pollution and carbon reduction [J]. *Journal of Environmental Engineering Technology*, 2023,13(6):2053-2062.
- [4] He X, Li Z, Xie C, et al. Carbon footprint of a conventional wastewater treatment plant: An analysis of water-energy nexus from life cycle perspective for emission reduction [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2023,429:139562.
- [5] 张石进,丁晶,王琨,等.污水生化处理中  $N_2O$  产生途径、影响因素及减排策略 [J]. *哈尔滨工业大学学报*, 2025,57(2):33-43. Zhang S J, Ding J, Wang K, et al.  $N_2O$  generation pathways, influencing factors and emission reduction strategies in wastewater biochemical treatment [J]. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 2025,57(2):33-43.
- [6] 张媛媛.污水生物脱氮过程中  $N_2O$  产生与减量控制研究进展 [A]// 中国建筑学会建筑给排水研究分会.中国建筑学会建筑给排水研究分会第三届第三次全体会员大会暨学术交流会论文集 [C]. 同圆集团设计有限公司, 2019:558-564. Zhang Y Y. Research progress on  $N_2O$  production and reduction control in the process of biological denitrification of sewage [A] // Building Water Supply and Drainage Research Branch of Architectural Society of China. Proceedings of the Third General Assembly of the Third General Assembly and Academic Exchange Meeting of the Building Water Supply and Drainage Research Branch of the Architectural Society of China [C]. Tong Yuan Design Group Co., Ltd, 2019:558-564.
- [7] 委燕,王淑莹,马斌,等.亚硝酸盐对外碳源反硝化过程  $N_2O$  还原的影响 [J]. *中国环境科学*, 2014,34(7):1722-1727. Wei Y, Wang S Y, Ma B, et al. The effect of nitrite on  $N_2O$  reduction during denitrification process using external carbon source [J]. *China Environmental Science*, 2014,34(7):1722-1727.
- [8] Kalbitz K, Solinger S, Park J, et al. Controls on the dynamics of dissolved organic matter in soils: a review [J]. *Soil Science*, 2000, 165(4):277-304.
- [9] Zhou T, Guo J, Liu Q, et al. DOM and DON transformation in full-scale wastewater treatment plants: Comparison of autotrophic and heterotrophic nitrogen removal units [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024,479:147810.
- [10] 刘朝荣,朱俊羽,李宇阳,等.太湖氧化亚氮( $N_2O$ )排放特征及潜在驱动因素 [J]. *环境科学*, 2022,43(8):4118-4126. Liu C R, Zhu J Y, Li Y Y, et al. Emission of nitrous oxide ( $N_2O$ ) from Lake Taihu and the corresponding potential driving factors [J]. *Environmental Science*, 2022,43(8):4118-4126.
- [11] Stow C, Walker J, Cardoch L, et al.  $N_2O$  emissions from streams in the Neuse River watershed, North Carolina [J]. *Environmental Science & Technology*, 2005,39:6999-7004.
- [12] Li J, Liang E, Deng C, et al. Labile dissolved organic matter (DOM) and nitrogen inputs modified greenhouse gas dynamics: A source-to-estuary study of the Yangtze River [J]. *Water Research*, 2024,253: 121318.
- [13] Ding H, Hu Q, Cai M, et al. Effect of dissolved organic matter (DOM) on greenhouse gas emissions in rice varieties [J]. *Agriculture Ecosystems & Environment*, 2022,330:107870.
- [14] 国家环境保护总局.水和废水监测分析方法(第四版) [M]. 北京:中国环境科学出版社, 2002,23. State Environmental Protection Administration. Standard methods for the examination of water and wastewater (4th Edition) [M]. Beijing: China Environmental Science Press, 2002,23.
- [15] 王金鹤.城镇污水处理厂中温室气体的释放研究 [D]. 济南:山东大学, 2011. Wang J H. Research on the greenhouse gas emissions from full-scale municipal wastewater treatment plants [D]. Jinan: Shandong University, 2011.
- [16] Yang C, Chen M, Yuan Q. The application of XGBoost and SHAP to examining the factors in freight truck-related crashes: An exploratory analysis [J]. *Accident Analysis and Prevention*, 2021,158:106153.
- [17] Wu Q, Wang J, He Y, et al. Quantitative assessment and mitigation strategies of greenhouse gas emissions from rice fields in China: A data-driven approach based on machine learning and statistical modeling [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2023,210: 107929.
- [18] Hudson N, Baker A, Ward D, et al. Can fluorescence spectrometry be used as a surrogate for the Biochemical Oxygen Demand (BOD) test in water quality assessment? An example from south west England [J].

- Science of the Total Environment, 2008,391:149–158.
- [19] Yu H, Song Y, Tu X, et al. Assessing removal efficiency of dissolved organic matter in wastewater treatment using fluorescence excitation emission matrices with parallel factor analysis and second derivative synchronous fluorescence [J]. *Bioresource Technology*, 2013,144:595–601.
- [20] Yu M, Liu S, Li G, et al. Municipal wastewater effluent influences dissolved organic matter quality and microbial community composition in an urbanized stream [J]. *Science of the Total Environment*, 2020,705:135952.
- [21] Tang G, Zheng X, Li X, et al. Variation of effluent organic matter (EfOM) during anaerobic/anoxic/oxic (A<sup>2</sup>O) wastewater treatment processes [J]. *Water Research*, 2020,178:115830.
- [22] Chen H, Ye J, Zhou Y, et al. Variations in CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub> productions and emissions driven by pollution sources in municipal sewers: An assessment of the role of dissolved organic matter components and microbiota [J]. *Environmental Pollution*, 2020,263:114489.
- [23] Xi J, Gong H, Guo R, et al. Characteristics of greenhouse gases emission from wastewater treatment plants operation in China (2009–2016): a case study using operational data integrated method (ODIM) [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2023,402:136829.
- [24] Angel R, Claus P, Conrad R. Methanogenic archaea are globally ubiquitous in aerated soils and become active under wet anoxic conditions [J]. *ISME Journal*, 2012,6(4):847–862.
- [25] Rodriguez-Caballero A, Aymerich I, Poch M, et al. Evaluation of process conditions triggering emissions of greenhouse gases from a biological wastewater treatment system [J]. *Science of the Total Environment*, 2014,493:384–391.
- [26] 吴珊,李浩,杜至力,等. AAO工艺氧化亚氮排放及生成机理分析 [J/OL]. *工业水处理*. <https://doi.org/10.19965/j.cnki.iwt.2024-0312>.  
Wu S, Li H, Du Z L, et al. Analysis of nitrous oxide emission and generation mechanisms in the AAO process [J]. *Industrial Water Treatment*. <https://doi.org/10.19965/j.cnki.iwt.2024-0312>.
- [27] Sun S, Cheng X, Li S, et al. N<sub>2</sub>O emission from full-scale urban wastewater treatment plants: a comparison between A<sup>2</sup>O and SBR [J]. *Water Science & Technology*, 2013,67(9):1887–1893.
- [28] Amaral V, Ortega T, Romera-Castillo C, et al. Linkages between greenhouse gases (CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, and N<sub>2</sub>O) and dissolved organic matter composition in a shallow estuary [J]. *Science of the Total Environment*, 2021,788:147863.
- [29] Barnes J, Upstill-Goddard R C. N<sub>2</sub>O seasonal distributions and air-sea exchange in UK estuaries: Implications for the tropospheric N<sub>2</sub>O source from European coastal waters [J]. *Journal of Geophysical Research-Biogeosciences*, 2011,116:G01006.
- [30] Wu H, Xu X, Cheng W, et al. Dissolved organic matter and inorganic N jointly regulate greenhouse gases fluxes from forest soils with different moistures during a freeze-thaw period [J]. *Soil Science and Plant Nutrition*, 2019,66:163–176.
- [31] Feng L, Wang R, Jia L, et al. Can biochar application improve nitrogen removal in constructed wetlands for treating anaerobically-digested swine wastewater? [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2020,379:122273.
- [32] 王林,张浩浩,吴兴海,等.反硝化生物滤池深度脱氮中试运行效能及微生物菌群分析 [J]. *同济大学学报(自然科学版)*, 2021,49(12):1727–1737.  
Wang L, Zhang H h, Wu X H, et al. Deep denitrification performance in pilot-scale denitrification biofilter system and microbial community [J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2021,49(12):1727–1737.
- [33] Palomo A, Pedersen A, Fowler S, et al. Comparative genomics sheds light on niche differentiation and the evolutionary history of comammox Nitrospira [J]. *ISME Journal*, 2018,12(7):1779–1793.
- [34] Liu T, He X, Jia G, et al. Simultaneous nitrification and denitrification process using novel surface-modified suspended carriers for the treatment of real domestic wastewater [J]. *Chemosphere*, 2020,247:125831.
- [35] 许明,刘伟京,白永刚,等.太湖蓝藻水华期可溶有机物的生物降解 [J]. *中国环境科学*, 2018,38(9):3494–3501.  
Xu M, Liu W J, Bai Y G, et al. Biodegradation of dissolved organic matter in Lake Taihu during cyanobacterial blooms [J]. *China Environmental Science*, 2018,38(9):3494–3501.
- [36] Dong Y, Liu J, Cheng X, et al. Wastewater-influenced estuaries are characterized by disproportionately high nitrous oxide emissions but overestimated IPCC emission factor [J]. *Communications Earth & Environment*, 2023,4:395.

**作者简介:**姜慧琪(2001-),女,河南周口人,山东大学硕士研究生,主要从事污水生物处理技术研究.发表论文 8 篇.202312882@mail.sdu.edu.cn.