

鲤体长与体内元素富集数学模型*

王继忠 徐小清

(中国科学院水生生物研究所, 武汉 430072)

A MATHEMATICAL MODEL FOR BODY LENGTH AND ELEMENT CONTENT IN THE BODY OF CARP

Wang Jizhong and Xu Xiaoqing

(Institute of Hydrobiology, the Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430072)

关键词 生物富集, 数学模型, 参数, 估计, LOF 检验

Key words Bioconcentration, Mathematical model, Parameter, Estimation, LOF test

鲤(*Cyprinus carpio* L.)是反映水环境中化学元素含量水平的一个好的指示生物。由于鱼体对水环境中元素和化合物的富集作用, 研究鲤体内元素的含量水平和富集模型, 探讨化学元素在鱼体中的生物富集动力学机制, 估计水体中化学元素的潜在环境危害和保护自然环境都具有重要的现实意义。

鱼体生长与其含量的数学模型的研究已有报道^[1], 但都侧重于鱼体对汞等污染物积累模型的研究, 并应用一元箱式模型描述室内鱼体对元素积累的实验结果, 分析决定稳态条件下的生物富集系数的因素^[2]。但这种模型没有考虑生物增长对积累的影响, 不宜用于描述鱼体对元素积累的长期效应和解释野外调查的观测资料。而随后发展的生物能量模型虽能描述和解释野外观测资料, 但许多参数必须通过实验数据来估计。为此, 作者建立了以鲤鱼体长为自变量的生长-含量数学模型, 以体长来反映鲤鱼的鱼龄和其生存水体中的营养水平, 并且使模型参数具有较明确的生物学意义。

1 模型的推导

假设鱼体从浓度为 C_w 的水中摄取元素的速率为 K_1 , 从含量为 C_f 的食物中摄取元素的速率为 K_2 , 而鱼体向体外排泄元素的速率为 K_3 , 鱼体摄食量和呼吸量与鱼体体重成正比(图1), 则根据物质平衡原理, 鲤鱼肌肉中元素总量 Q_t 可由下列方程的解表示^[3]:

$$\frac{dQ_t}{dt} = K_1 C_w W_t + K_2 C_f W_t - K_3 Q_t \quad (1)$$

(1)式中 W_t 为 t 时刻鱼的体重。又根据鱼类生态学原理, 得出下列关于体重与体长的两个基本方程:^[4]

$$W_t = K_4 L_t^{K_5} \quad (2)$$

$$L_t = L_\infty (1 - e^{-K_1 t}) \quad (3)$$

(2)、(3)式中 L_t 为 t 时刻的鱼体长, L_∞ 为所考察鱼类在某一环境中的极限体长。

由(3)式, 有

* 1990年7月2日收到。

$$\frac{dt}{dL_t} = \frac{1}{K(L_\infty - L_t)}$$

将上式和(2)式代入基本方程(1)式:

$$\frac{dQ_t}{dt} = (K_1 C_w + K_2 C_f) K_4 L_t^{K_5} - K_3 Q_t$$

所以:

$$\frac{dQ_t}{dL_t} = \frac{dQ_t}{dt} \cdot \frac{dt}{dL_t} = \frac{K_4 (K_1 C_w + K_2 C_f)}{K(L_\infty - L_t)} L_t^{K_5} - K_3 \frac{Q_t}{K(L_\infty - L_t)} \quad (4)$$

令:

$$K_4 (K_1 C_w + K_2 C_f) / K = A$$

$$L_\infty = B$$

$$K_5 = C$$

$$K_3 / K = D$$

则(4)式可简写成:

$$\frac{dQ_t}{dL_t} = \frac{A}{B - L_t} L_t^C - \frac{D}{B - L_t} Q_t \quad (5)$$

方程(5)就是以 L_t 为自变量的含量-生长模型。模型中 4 个参数均有较明确的生物学意义:参数 A 是在单位时间单位重量鱼体的元素吸收量,参数 B 为鱼体在某一特定营养条件下的极限体长,参数 C 是鲤重量增重系数与长度增长系数的比值,而参数 D 是与排泄和生长有关的常数。

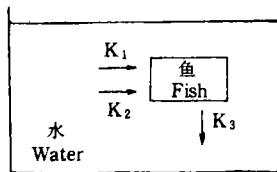


图 1 鱼体摄取和排泄化学元素示意图

Fig.1 Simple three-compartment model for the uptake and clearance of a chemical by fish

2 模型参数的估计

尽管基本方程(5)从数学形式上看并不很复杂,但因参数 C 不是自然数,要想得到方程(5)的解析解还是相当困难的。因此分两步估计模型参数:第一步用一般线性回归法求出方程(2)的两个参数,则有 $\hat{C} = K_5$, 第二步选用非线性稳态模型的参数估计——Marquardt 法来估计剩下的 3 个参数 $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{D})$ ^[4]。如有必要,可将两步估计出的 4 个模型参数 $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D})$ 再次作为 Marquardt 法的初值进行优化计算,最后确定出 4 个模型参数。在应用 Marquardt 法估计参数的同时,采用常微分方程组数值解法的 Kutta-Merson 法和数值微分法求得计算中所需要的函数值 $Q(L)$ 和关于参数的 Jacobi 矩阵中的偏导数值^[5],并在误差平方和为目标函数 $SR = \sum_{i=1}^n (Q(L_i) - \hat{Q}(L_i))^2$ 的条件下,编制出 Pascal 程序,在微机(IBM PC / XT)上的计算时间一般在 5—60min 之间。

3 模型的检验

通过上面模型参数的估计,可以得到一组基于实验数据的参数 $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D})$,至于实验数据是否适合该实验模型,除了一般常用的方差分析检验外,还可采用拟合差异度检验法(Lack of Fit Test)^[6]。

LOF 检验法:

设有试验数据的集合 S

$$S = \{(L_i, Q_i) | i = 1, 2, 3, \dots, n\}$$

现将 S 分割成 K 个子集合 S_j :

$$S_j = \{(L_{ij}, Q_{ij}) | L_{1j} = L_{2j} = \dots = L_{nj}\}$$

并且满足条件:

$$\sum_{j=1}^k n_j = n, \quad \sum_{j=1}^k S_j = S, \quad k < n, \quad S_j \neq \emptyset$$

令:

$$\bar{Q}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} Q_{ij} \quad SE_j = \sum_{i=1}^{n_j} (Q_{ij} - \bar{Q}_j)^2$$

则实验的纯误差:

$$SE = \sum_{j=1}^k SE_j$$

又因为 SE_j 的自由度为 $n_j - 1$, 故 SE 的自由度为:

$$\sum_{j=1}^k (n_j - 1) = n - k$$

因为总误差 SR 的自由度为 $n - 2$, 所以拟合误差 $SL = SR - SE$ 的自由度为:

$$n - 2 - (n - k) = k - 2$$

由数理统计知:

$$F = \frac{SL / (k - 2)}{SE / (n - k)}$$

服从自由度为 $(k - 2, n - k)$ 的 F -分布, 于是取定显著性水平 α , 如果 $F > F_\alpha(k - 2, n - k)$, 则认为数据不符合此实验模型, 如果 $F < F_\alpha(k - 2, n - k)$, 则称数据对模型有较好的拟合, 即符合此模型。为了更全面地反映模型拟合程度的优劣, 还定义了非线性相关系数 R_{nl} 和非线性确定性系数 $B_{nl} = R_{nl}^2$ [7]:

$$\text{设} \quad \bar{Q} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i$$

$$S_y = \sum_{i=1}^n (Q_i - \bar{Q})^2$$

则

$$R_{nl} = (1 - SR / S_y)^2$$

4 范例与讨论

在洞庭湖水系水环境背景值的研究中, 作者在湖南洋头水库收集鲤鱼样品 36 尾, 分别测定其体长和体重, 并按水生生物元素背景值的研究程序, 测定鱼体肌肉中的砷、镉、铜、铁、汞、铅、锌、镁等元素的含量。并应用上述的参数估计法, 对这 8 个元素分别进行实算, 其主要结果列于表 1。

由 8 个元素分别计算出洋头水库鲤的极限体长的平均值为 87.14cm, 相对标准偏差为 $\pm 10.5\%$ 。这些计算结果表明所建立的含量—生长模型(5)是可行的, 即此模型可以从元素的生物富集动力学的角度定量地描述化学元素在鲤体内的富集行为。该模型与一般回归模型相比, 具有较明确生物学意义的

模型参数,拟合精度高,同时也可能利用模型参数比较不同水环境条件和营养水平下鱼类对化学元素的富集行为,研究鱼类群体在稳态条件下对元素或化合物的生物积累机制。

表 1 洋头水库模型参数

Tab.1 Model Parameters for the Pantou Reservoir

元素 Elements	A	B	C	D	R _{nl}	B _{nl}	APR(%) [*]	LOF Test ^{**}
As	0.000077	99.64	2.7471	7.48164	0.8306	0.6898	31.73	符合
Cd	0.000034	87.43	2.6824	6.98062	0.3814	0.1454	62.30	符合
Cu	0.005000	70.73	2.7471	60.0000	0.8396	0.7049	24.40	符合
Fe	0.021233	85.48	2.7471	8.48971	0.8790	0.7726	29.26	符合
Hg	0.000063	94.53	2.7471	5.84039	0.8629	0.7440	27.55	符合
Mg	0.002741	84.83	2.7078	30.0000	0.9752	0.9511	12.98	符合
Pb	0.000035	94.22	2.7471	5.30207	0.4015	0.1612	37.12	符合
Zn	0.109000	80.26	2.7471	65.0000	0.7649	0.5851	28.15	符合

* 平均误差百分率(Average percentage of residual)。

** 显著性水平为 0.01 (Significant level is 0.01)。

表 2 不同水系模型参数比较

Tab. 2 Comparison of model parameters for different water systems

水系 Water system	A	B	C	D	R _{nl}	APR(%)
Fe:						
太湖	0.065052	85.25	2.3195	5.36365	0.8781	26.06
滇池	0.035000	85.25	2.9420	40.6500	0.8921	23.21
丹江水库	0.011756	64.60	3.0303	15.0964	0.7745	34.18
Hg:						
太湖	0.000074	69.63	2.3195	0.39679	0.9482	27.67
滇池	0.000001	67.21	2.9420	3.23225	0.9529	43.95
丹江水库	0.000016	91.72	3.0303	9.36670	0.5389	65.28
Mg:						
太湖	0.000537	94.13	2.3195	4.29242	0.9854	13.02
滇池	0.000045	67.49	2.9420	5.64568	0.9803	26.35
丹江水库	0.000054	77.99	3.0303	6.80797	0.9445	18.90
Se:						
太湖	0.001902	95.48	2.3195	0.29051	0.9345	21.35
滇池	0.000820	90.25	2.9420	0.71500	0.9033	29.97
丹江水库	0.000508	83.78	3.0303	1.12308	0.8376	50.43

为了便于对比分析,对太湖、滇池和丹江水库中采集的鲤鱼肌肉中铁、汞、镁和硒元素进行了计算。结果列于表 2。太湖、滇池和丹江水库中鲤鱼的极限体长的平均值分别为 86.12、75.33 和 79.52,其相对标准偏差分别为 13.8%、15.5% 和 14.4%。这个结果指出所考察的 4 个元素均对模型有较好的拟合,并且以常量生命元素镁为最佳。根据不同水体中鲤鱼的极限体长、不同年龄鲤鱼的平均体长和值,利用鱼体生长方程可分别计算出鱼体的生长率和不同元素的代谢率。计算结果表明(表 3),在不同水环境中,镁元素在鱼体中的代谢率基本相近,平均值为 0.739,相对标准偏差为 8.9%。而硒、铁和汞元素的代谢

率相差较大,其平均值分别为 0.090、2.57、0.529,相对标准偏差分别为 48%、85%、102%。产生这种误差的原因较为复杂,可能与这些元素在鱼体中的形态或功能有关。太平湖、滇池和丹江水库鲤肌肉中的有机汞分别占总汞的 63.5%、74.6%、81.4%,这种形态比例差异的元素可能影响着它们的代谢强度。这种现象有待进一步研究。

表 3 不同水系 K_3 的比较Tab. 3 Comparison of K_3 for different water systems

参数 Parameters	太平湖	滇池	丹江水库
L_∞ (cm)	86.12 ± 11.89	77.53 ± 11.86	79.52 ± 11.43
K	0.164	0.124	0.120
K_3 (Mg)	0.703	0.698	0.816
K_3 (Se)	0.048	0.088	0.134
K_3 (Fe)	0.878	5.028	1.808
K_3 (Hg)	0.065	0.399	1.122

参 考 文 献

- [1] 徐小清、邓冠强等。鱼体生长对其体内微量元素含量的影响。见:第四次中国海洋湖沼科学会议论文集,北京:科学出版社,1991: 128—134。
- [2] 朱志宁,郎佩珍。12种有机物在鲤鱼体内富集与释放行为的研究。环境科学学报,1987,7(3): 339—346。
- [3] Neely W B. Chemical in the Environment, New York: Marcel Dekker Inc. 1980: 245。
- [4] 席少霖,赵风治。最优化计算方法,上海:科学技术出版社,1983: 461。
- [5] 上海计算技术研究所。电子计算机算法手册,上海:教育出版社,1982: 1052。
- [6] Bethea R M, Duran B S, Boullion T L. Statistical Methods for Engineer and Scientists. New York. Marcel Dekker Inc., 1975: 583.
- [7] Sachs L, Applied Statistics, Springer-Verlag, New York 1982: 706.