

稳定同位素质量平衡混合模型的性能评估

祝孔豪 李斌 王康 郭钰伦 王维康 徐军

STABLE ISOTOPE MIXING MODEL EVALUATION: QUANTIFYING THE QUALITY OF PREDICTIONS

ZHU Kong-Hao, LI Bin, WANG Kang, GUO Yu-Lun, WANG Wei-Kang, XU Jun

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7541/2022.2020.253>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

水域生态学中生物稳定同位素样品采集、处理与保存

PROTOCOLS FOR SAMPLE COLLECTION, PRETREATMENT AND PRESERVATION OF AQUATIC ORGANISMS IN STABLE ISOTOPE ECOLOGY

水生生物学报. 2020, 44(5): 989–997 <https://doi.org/10.7541/2020.114>

克氏原螯虾两种养殖模式的食物网结构及其食性比较

FEEDING HABITS OF *PROCAMBARUS CLARKIA* AND FOOD WEB STRUCTURE IN TWO DIFFERENT AQUACULTURE SYSTEMS

水生生物学报. 2020, 44(1): 133–142 <https://doi.org/10.7541/2020.016>

川东南小型水库营养结构特征的稳定C、N同位素分析

CHARACTERIZING THE TROPHIC STRUCTURE OF A SMALL RESERVOIR IN SOUTHEAST OF SICHUAN PROVINCE USING STABLE CARBON AND NITROGEN ISOTOPE ANALYSIS

水生生物学报. 2017, 41(6): 1345–1353 <https://doi.org/10.7541/2017.166>

蜡质标本制作与保存对沉水植物稳定同位素的影响

EFFECTS OF PREPARATION AND PRESERVATION OF HERBARIUM SPECIMENS ON STABLE ISOTOPES OF SUBMERGED MACROPHYTES

水生生物学报. 2019, 43(3): 589–594 <https://doi.org/10.7541/2019.071>

长江口水生动物食物网营养结构及其变化

TROPHIC STRUCTURE OF FOOD WEB AND ITS VARIATION ON AQUATIC ANIMALS IN THE YANGTZE ESTUARY

水生生物学报. 2019, 43(1): 155–164 <https://doi.org/10.7541/2019.019>

伊洛河马口鱼遗传差异及其种群分化研究

GENETIC DIVERGENCE AND POPULATION DIFFERENTIATION ANALYSIS OF *OPSARIICHTHYS BIDENS* FROM YILUO HE

水生生物学报. 2020, 44(2): 339–345 <https://doi.org/10.7541/2020.041>



稳定同位素质量平衡混合模型的性能评估

祝孔豪¹ 李斌² 王康¹ 郭钰伦¹ 王维康^{3*} 徐军^{1*}

(1. 中国科学院水生生物研究所, 武汉 430072; 2. 内江师范学院, 内江 641100; 3. 深圳市利源水务设计咨询有限公司, 深圳 528031)

摘要: 稳定同位素技术可以用于消费者营养溯源, 以确定多种营养来源对消费者营养的贡献比重。因此, 稳定同位素质量平衡混合模型已经是消费者营养溯源分析的必要方法之一。通常使用贝叶斯混合模型来估计不同营养来源的贡献; 此类模型提供了每个营养来源对消费者的贡献比例的概率分布特征。然而, 混合模型拟合结果的好坏, 及其与实际生态学理论的匹配水平, 是模型性能的重要评价内容。例如, 模型在不能很好地解析营养来源贡献时, 仍将返回默认先验结果, 给模型解释带来困难。为直接避免同位素构建消费者营养溯源分析中的诸多技术问题, 文章将综述在拟合和评估贝叶斯混合模型时遵循的最佳实践。因此, 文章基于实测的同位素数据集(蒙古鲌 *Culter mongolicus mongolicus* 同位素数据集), 通过识别消费者营养功能类群特征、改变营养来源先验信息特征, 构建系列贝叶斯模型; 通过比较模型总体性能、实测值与预测值差异, 及先验信息和后验信息差异等多种模型性能评价方法, 来描述模型性能评价的方法和过程。通过这些方法的综合运用, 将进一步提高消费者营养溯源准确性, 为更深刻地认识食物网规律提供科学支撑。

关键词: 食物网; 稳定同位素; 贝叶斯混合模型; 模型性能; 消费者

中图分类号: Q-34 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-3207(2022)03-0427-12



稳定同位素技术是研究食物网生态学的重要手段^[1-4]。与直接观察摄食或胃肠含物分析等技术手段相比, 稳定同位素技术能反映较长时间尺度内消费者营养来源的整合特征^[1, 5]。基于稳定同位素质量平衡模型, 稳定同位素技术可用于消费者营养溯源, 即确定多种营养来源对消费者的贡献比重^[6-8]。作为稳定同位素质量平衡模型的重要分支, 贝叶斯混合模型考虑了营养来源的不确定性, 并允许纳入协变量, 所以近十多年来得到了广泛的应用^[9]。通常使用贝叶斯混合模型来估计不同营养来源的贡献; 此类模型在贝叶斯混合模型输出了每个营养来源对消费者贡献比例的概率分布特征^[10], 因此其假设之一就是营养来源对消费者贡献比重满足(0, 100%)的条件。当引入某种营养来源进入

模型时, 就存在了消费者确实依赖了这种营养来源的先验假设; 一个营养来源的贡献比例高, 必然会降低其他营养来源的贡献比例, 导致营养来源贡献比例不确定性增加^[11]。因此, 评估贝叶斯混合模型性能, 就需要评价贝叶斯混合模型拟合结果的优劣, 及其与生态学理论和研究背景的匹配程度。

本文基于实测同位素数据集(蒙古鲌 *Culter mongolicus mongolicus* 同位素数据集), 通过识别消费者营养功能类群特征、改变营养来源先验信息特征, 构建系列贝叶斯模型; 通过比较模型总体性能、实测值与预测值差异, 及先验信息和后验信息差异等多种模型性能评价方法, 来描述模型性能评价的方法和过程, 以此为应用稳定性同位素技术开展消费者营养溯源研究, 提供模型性能评估体系。

收稿日期: 2020-10-18; **修订日期:** 2021-04-06

基金项目: 国家重点研发计划(2018YFD0900904); 中国科学院国际合作重点项目(152342KYSB20190025); 深圳市技术创新计划技术攻关项目(水2017006)资助 [Supported by the National Key Research and Development Program of China (2018YFD0900904); the International Cooperation Project of the Chinese Academy of Sciences (152342KYSB20190025); Shenzhen Technology Innovation Program: Technology Research Project (Water 2017006)]

作者简介: 祝孔豪(1998—), 男, 硕士研究生; 主要从事生态系统食物网研究。E-mail: zhukonghao@ihb.ac.cn

通信作者: 王维康(1980—), 男, 高级工程师; 主要从事水务建设与水生生态修复工程设计与研究。E-mail: zhukonghao98@gmail.com 徐军(1978—), 男, 研究员, 博士生导师; 主要从事水域生态学与同位素生态学研究。E-mail: xujun@ihb.ac.cn *共同通信作者

1 稳定同位素数据

1.1 鮡稳定同位素数据集

本研究中蒙古鮡数据引自李斌等^[12]。实验材料于2010年7月采自三峡库区腹地北岸支流小江。同位素样品在西南大学地理科学学院地球化学与同位素实验室(设备型号: Flash EA112HE DELTA plus XP)完成测试, 其分析精度 $\delta^{13}\text{C} < 0.02\text{‰}$, $\delta^{15}\text{N} < 0.03\text{‰}$ 。样品的收集、处理和保存方法如徐军等^[13]所描述。

1.2 种群营养功能群

采用K-means聚类对消费者稳定同位素值进行聚类, 并划分种群营养功能群。K-means聚类属于无监督学习聚类。基本原理是从 n 个数据对象任意选择 k 个对象作为初始聚类中心点^[14]; 根据每个聚类对象的中心点, 计算每个数据对象与这些中心点的距离; 并根据最小距离重新对相应数据对象进行划分; 重新计算每个聚类中心点, 反复循环至每个聚类不再发生变化^[14, 15]。

较为常见的聚类效果评估方法是总体类内误差平方和(Total within sum of the squared errors)评估(公式1), 即肘部法则(Elbow Method)^[14, 15]。

$$SSE = \sum_{i=1}^K \sum_{p \in C_i} |p - m_i|^2 \quad (1)$$

式中, C_i 是第 i 个簇; p 是 C_i 中的样本点; m_i 是 C_i 的质心(C_i 中所有样本的均值); SSE 是所有样本的聚类误差^[14]。随着聚类数 k 的增大, 总体类内误差平方和减小, SSE 随着分组增加而降低; 在达到某个临界点时, SSE 得到极大改善, 之后缓慢下降, 形成一个“肘部”形状的关系; 这个临界点附近的聚类数 k 即可作为聚类性能较好的分组^[14, 15]。

本研究分析表明, 在对消费者蒙古鮡的稳定同位素值进行聚类过程中, 发现在 $k=4, 5, 6$ 时, SSE 值形成的“手肘”形状关系; 但是分组的增加所获得的 SSE 值下降的回报不高(图1A)。结合湖泊生态学基本理论和消费者种群内营养功能群的特点^[16-18], 本文设置了一个聚类 k 值的选择条件, 即某 k 值($k>1$)聚类所获得的 SSE 值与 $k=1$ 时 SSE 值的比值小于15%时, 则分组回报不足。基于这个聚类原则, 对消费者蒙古鮡的稳定同位素值进行聚类, 最佳聚类数选3(图1A), 分别代表鱼类食性为主(Piscivorous)、浮游动物食性为主(Planktivorous)和底栖动物食性为主(Benthivorous)等食物网功能类型(图1B)。种群营养功能群的识别, 既有助于减小消费者同位素变异所带来的不确定, 又有助于理解消费者在食物网

的功能^[19, 20]。

1.3 营养富集因子与源矫正

构建贝叶斯混合模型的一个重要前提条件是消费者与营养来源间的同位素的差异^[21, 22]。这种差异由消化和代谢过程中同位素分馏引起, 被称为营养富集因子(Trophic enrichment factor, TEF, Δ), 其定义为 $\Delta = \delta_{\text{tissue}} - \delta_{\text{diet}}$ (δ 代表样品的同位素比值与标准物质的同位素比值之间的相对差异)^[23]。由于TEF受到从生理到营养来源的多种因素影响, 实际研究中多采用营养级富集因子的统计平均值(或多个统计平均值)进行分析, 以获得最接近富集因子真实值的近似值, 从而更好地估算该种类的食物来源^[21, 22]。例如, $\delta^{15}\text{N}$ 在相邻两个营养级间所产生的富集因子($\Delta\delta^{15}\text{N}$)在3‰—5‰^[24], 而 $\delta^{13}\text{C}$ 在相邻营养级间富集因子($\Delta\delta^{13}\text{C}$)为0.4‰—1.0‰^[25]。

在本研究中, 消费者蒙古鮡是典型的肉食性消费者, 本研究使用 $\Delta\delta^{15}\text{N} = (3.4 \pm 0.99)\text{‰}$ 和 $\Delta\delta^{13}\text{C} = (0.39 \pm 1.14)\text{‰}$ 对营养来源的稳定碳氮同位素进行矫正, 即 $\Delta + \delta_{\text{diet}}$ ^[21, 22]。结合蒙古鮡食性对食物来源进行整合, 形成四类营养来源用于模型构建, 包括浮游动物、底栖动物、浮游鱼类和底栖鱼类(图2, 食物来源 δ 值数据来自李斌等^[12]的实测数据)。TEF的不确定性(标准误差), 通过统计平方公差法(Root-Sum-Squares Error), 整合到食物来源同位素的误差中(公式2), 用来反映数据误差的整体特征^[26]。

$$RSSE = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sigma^2} \quad (2)$$

式中, σ 为标准差。

同位素混合空间中(图2)营养来源和消费者同

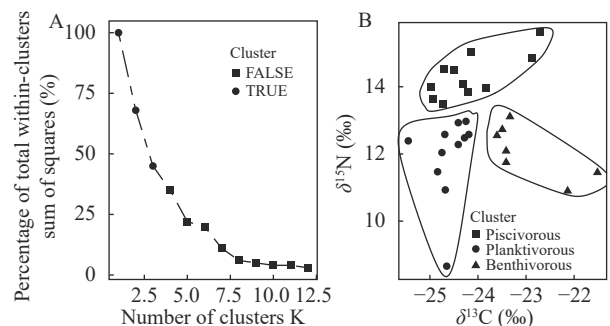


图1 种群内营养功能群的确定

Fig. 1 Within-population trophic functional groups

A. K-means聚类与总体类内误差平方和百分比特征; B. 鱼类食性为主、浮游动物食性为主和底栖动物食性为主的3个功能类型
A. K-means cluster and percentage of total within sum of the squared errors; B. Three trophic functional groups, including piscivorous, planktivorous, and benthivorous

位素之间的共线性, 及不同营养来源之间的差异水平等情况, 可会导致统计上多种营养来源贡献的等效解决方案, 也需尽量避免^[27]。结合多元方差分析 (Multivariate analysis of variance, MANOVA), 结果表明4种潜在食物来源表现出一种或一种以上的稳定同位素显著差异 ($P < 0.05$), 且共线性特征不显著 (图2), 适合进一步分析消费者的食物来源。

1.4 建模数据质量检验

TEF的选择及源矫正的合理性, 对稳定同位素质量平衡混合模型的结果影响很大^[21]。混合模型的基本假设之一就是, 消费者的稳定同位素必须属于多种食物来源稳定同位素所定义的同位素混合空间^[9]。特别需要指出的是, 本研究案例中的贝叶斯混合模型, 其数学性质是即使数据不符合稳定同位素混合的基本假设, 也会获得方程的解^[9, 10]。因此, 必须检查消费者稳定性同位素数据是否绝大多数落入多种营养来源确定的同位素混合空间中^[28]。

尽管通过营养富集因子校正后的稳定同位素混合空间 (图2), 可以初步进行判断; 但直观观察很难准确确定哪些样本属于混合多边形。由于贝叶斯建模包含不确定性 (本例中为均值和标准偏差), 需要借助一定的统计学方法来判断哪些消费者在模型求解过程中产生错误的风险较高。本研究采取混合多边形迭代模拟的方法来判别数据落入混合多边形的可能性。基本方法是, 基于TEF校正后的各种营养来源的同位素均值和标准偏差, 迭代生成10000次稳定同位素混合多边形; 进一步计算消费者稳定同位素落入这些混合多边形的频次; 消费

者稳定同位素落在 > 0.05 可能性区域, 为数据质量符合建模需要 (图3A、3B和3C)。

如前文所述, 同位素混合空间中营养来源和消费者之间的共线性, 可为营养来源贡献提供多种在统计上等价的解决方案^[9, 10]。引起这种不确定性的主要特点是, 当消费者的稳定同位素处于由营养来源所构成的同位素空间中心区域时, 模型无法确定营养来源比例。因此, 当稳定同位素混合空间质心区域消费者样本过多时, 共线性增加, 稳定同位素混合空间模型求解不会收敛或预测值与观测值不能较好匹配^[29]。本研究采取混合多边形迭代模拟的方法来判别数据质量。基本方法是, 基于TEF校正后的各种营养来源的同位素均值和标准偏差, 迭代生成10000次高风险混合同位素空间 (以质心为中心的50%不规则多边形面积内)^[28, 29], 进一步计算消费者同位素落入风险高的混合空间的次数; 通过计算落入混合空间次数与迭代次数的比值, 基于统计学频次计算落入高风险稳定同位素混合空间的概率, 来检验数据建模的质量; 消费者稳定同位素落在 < 0.95 可能性区域, 为数据质量符合建模需要 (图3D、3E和3F)^[28, 29]。

由图3所示 (等值线颜色深浅显示了概率轮廓), 本研究数据总体质量较高。图3A、3B和3C则显示了消费者蒙古鮠同位素值的变化将如何影响营养来源混合模型合理求解的概率^[28]。95%概率轮廓内的消费者蒙古鮠样品可用于混合模型使用, 也就是说其中一个样本 (16号个体) 位于营养来源之外, 因此模型解释程度低, 在后续建模分析中予以剔除。图3D、3E和3F则显示了消费者蒙古鮠同位素值的变化将如何影响营养来源混合模型低估风险的概率^[29]。消费者蒙古鮠样品落入风险区的概率总体低于50%, 未出现高于95%概率的样本。

需要强调的是, 如果在上述统计方法检验过程中, 发现较多的样本不适用于建模, 则必须考虑研究假设中是否存在1) 测量过程的错误、和/或2) 消费者的重要食物来源被忽略、和/或3) 营养富集因子使用不合理等问题。

2 贝叶斯质量平衡混合模型

2.1 先验信息

“从先验信息中获益 (Profiting from prior information)” 是贝叶斯建模中的一个常见想法^[30, 31]。因此, 先验信息的确定是稳定性同位素质量平衡混合模型的一个重要条件。为特定研究设计建立合理的信息先验是建立贝叶斯模型的最佳方案。因此, 在开展研究前, 需要投入大量的时间和精力进

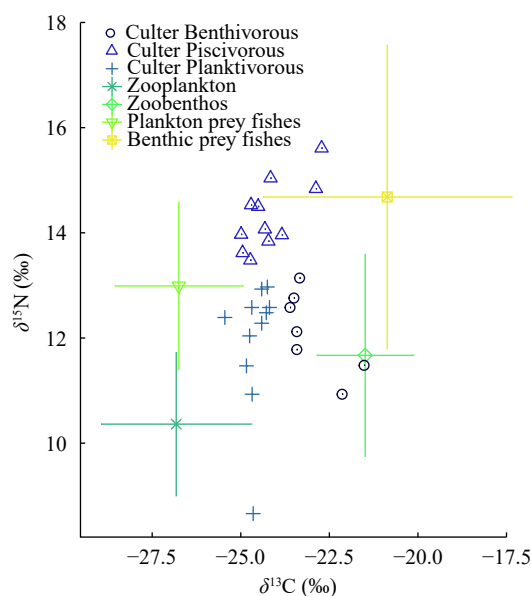


图2 营养富集因子校正后的稳定同位素混合空间

Fig. 2 Trophic enrichment factor corrected isospace

行数据收集和分析,了解哪些数据满足了前期的假定条件,提升进一步建模分析的准确性^[32]。当观测样本量或代表性有限时,贝叶斯模型将观测值与先验信息相结合,提升模型预测的准确性。在消费者营养溯源研究中,尽管使用胃肠含物来评估营养来源具有一定的局限性^[33],但为同位素技术的研究提供了较好的先验信息,可以提高混合模型预测的准确性^[34]。此外,环境中潜在食物来源丰度、生物量和消费者摄食行为习性等,均可作为重要的先验信息,以提高混合模型预测的准确性^[34]。

本研究展示了3个营养来源贡献的先验信息,包括默认先验(Uninformative)、信息先验(Informative)和高信息先验(Informative with SD; 图4)。针

对4种营养来源,包括浮游动物、底栖动物、浮游鱼类和底栖鱼类,默认先验的营养来源贡献由均值为零、标准偏差为1的正态分布混合确定,并进行中心化对数比转换(Centralized logarithm ratio transformation)^[35],从而产生均值为0.25且营养来源边际贡献大的分布特征($SD \approx 0.2$)。信息先验是基于蒙古鮠的食性分析数据,4种来源质量比例均值分别为16.7%、28.3%、20.6%和34.4%,依据上述方法获得营养来源边际贡献水平较大的分布特征($SD \approx 0.2$)。高信息先验的情景则是在此基础上,结合食性数据变化的标准偏差特点,在均值不变的条件下,对所有营养来源使用了 $SD \approx 0.06$ 的标准偏差(图4)。在进一步建模分析中,本研究采用高信息先验的情景

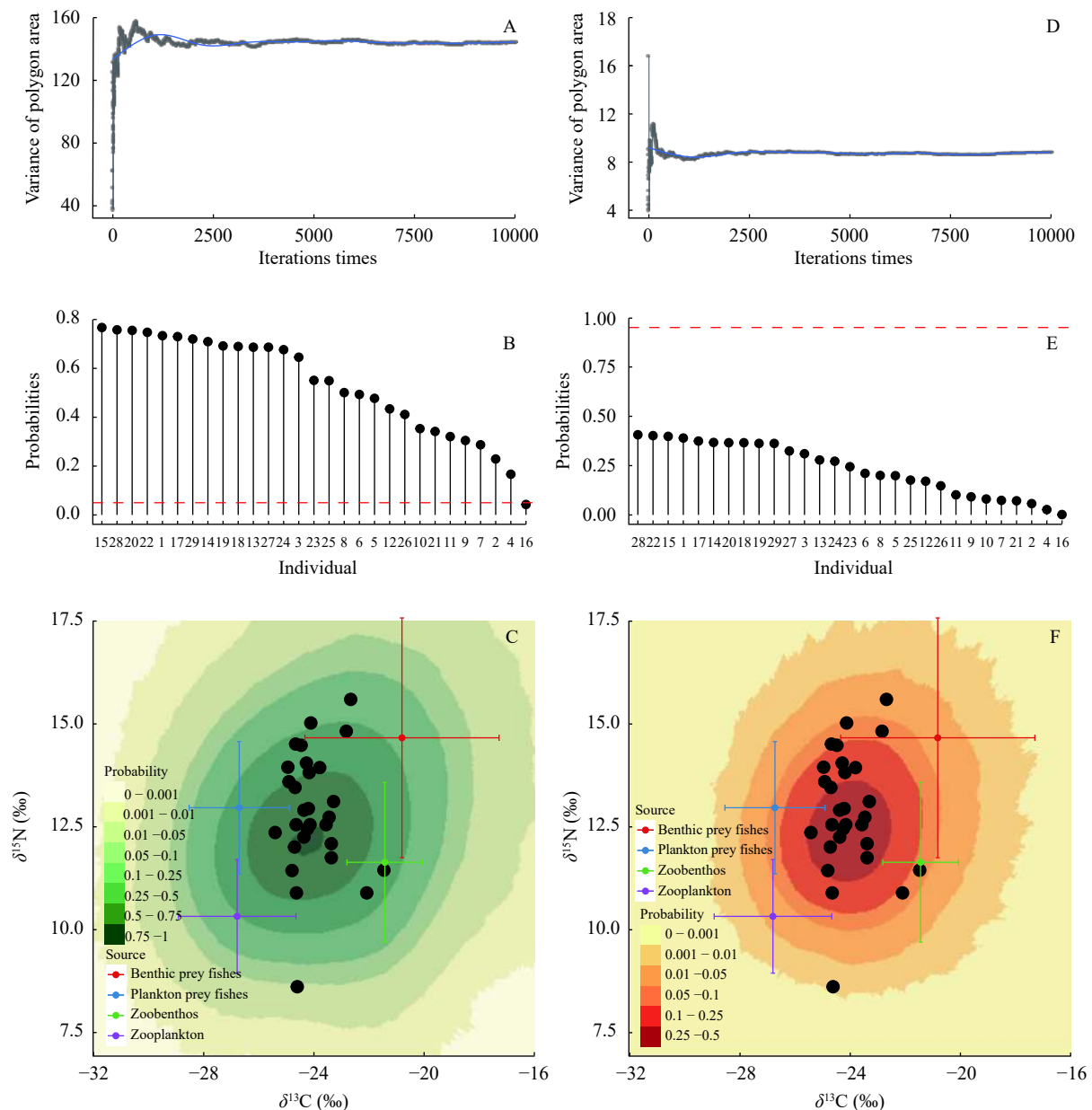


图3 混合多边形迭代模拟

Fig. 3 Mixing polygon simulation

来分析蒙古鲈数据集。

2.2 模型构建

本研究使用R包simmr来拟合所有的同位素贝叶斯混合模型(iter=50000, burn=1000, thin=10, n.chain=4), 并使用JAGS(Just Another Gibbs Sampler)从后验分布中提取样本。通过马氏链(Markov chain, MCMC)轨迹图检验法、Geweke检验法和Gelman检验法等多种方法诊断了马氏链的收敛性, 进一步估计有关参数或者进行其他统计推断。模型结果表明(表 1), 蒙古鲈鱼食性功能群的浮游饵料鱼的比重最高, 其次为底栖饵料鱼; 蒙古鲈浮游动物食性功能群的浮游动物和浮游饵料鱼的比重高; 蒙古鲈底栖动物食性功能群的底栖动物能量贡献比例最高, 结果整体符合预期。

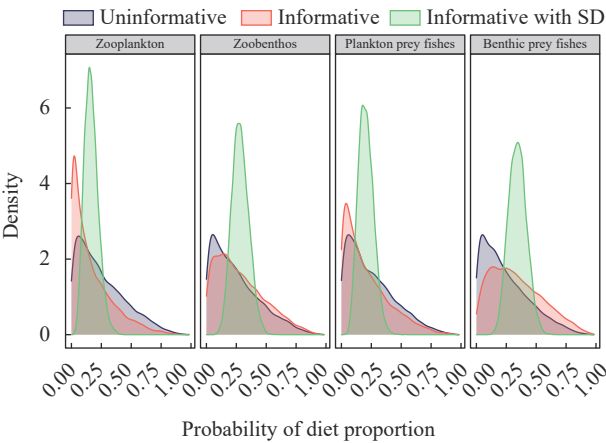


图 4 先验信息的不同情景
Fig. 4 Priori information of three scenarios

表 1 模型结果
Tab. 1 Model results

营养聚类 Trophic cluster	营养来源 Sources	平均值 Mean	标准差 SD	2.50%	50%	97.50%
鱼类食性 Piscivorous	Zooplankton	0.237	0.038	0.168	0.235	0.314
	Zoobenthos	0.243	0.038	0.173	0.242	0.322
	Plankton prey fishes	0.268	0.041	0.192	0.267	0.352
	Benthic prey fishes	0.252	0.039	0.182	0.250	0.335
浮游动物食性 Planktivorous	Zooplankton	0.274	0.039	0.200	0.273	0.355
	Zoobenthos	0.244	0.035	0.178	0.243	0.315
	Plankton prey fishes	0.271	0.041	0.195	0.270	0.355
	Benthic prey fishes	0.211	0.031	0.155	0.210	0.277
底栖动物食性 Benthivorous	Zooplankton	0.242	0.038	0.173	0.240	0.322
	Zoobenthos	0.273	0.044	0.193	0.271	0.363
	Plankton prey fishes	0.233	0.037	0.167	0.231	0.311
	Benthic prey fishes	0.251	0.037	0.182	0.250	0.329

3 模型性能评价

3.1 整体性能

在模型选择阶段, 常见指标为偏差信息量准则 (Deviance information criterion, DIC)。DIC是等级模型化的赤池信息量准则(Akaike information criterion, AIC), 被广泛应用于由马尔可夫链蒙特卡洛 (MCMC)模拟出的后验分布的贝叶斯模型选择问题^[36]。和赤池信息量准则一样, 偏差信息量准则是随样本容量增加的渐近近似, 只应用于后验分布呈多元正态分布的情况^[11, 37]。一般而言, 偏差信息量准则的值越小, 模型越好。这一准则的优点是它很容易从马尔可夫链蒙特卡洛(MCMC)模拟产生的样本中计算出来^[36]。在一组供选择的模型中, 如果观测值样本数不同的时候, 可使用校准的DIC(DIC_{cor})进行比较(公式3)^[11, 37], 公式如下:

$$DIC_{cor}=\frac{n}{N} \bar{D}+p_D$$
 (3)

式中, N 表示每个模型的样本数, n 为比较的模型中样本数最低的数据。

例如, 本研究中蒙古鲈鱼食性功能群、浮游动物食性功能群和底栖动物食性功能群的3个模型的样本数分别为11、10和7; 因此, 计算 DIC_{cor} 的时候, 取值 $n=7$ 。由此模型整体性能评价结果表明(表 2), 蒙古鲈鱼食性功能群、浮游动物食性功能群和底栖动物食性功能群的拟合总体较好(90% Coverage均为100%, 90% Coverage为观测值落入90%后验分布中的比例)。但3个模型比较看, 鱼食性功能群的拟合模型性能相对较差(DIC和 DIC_{cor} 最高)。需要特别指出的, 在一组供选择的模型中, 最优化的模型的选择都是具有相对性的, 并不是说所选择的模型就一定足够精确。

3.2 预测值与观测值

针对消费者营养来源研究, 模型性能核心是指营养来源比例在不同方法下的预测效果, 但是实践中很难获得消费者营养来源贡献的合理观测值。因此, 通过评估消费者同位素的观测值(y)与预测值

表 2 模型整体性能评价
Tab. 2 Model performance

营养聚类 Trophic cluster	偏差信息量 DIC	校准偏差信息量 则 DIC_{cor}	参数有效 数量 p_D	90% Coverage	模型样本 数 N
鱼类食性 Piscivorous	80.12	49.18	2.83	100	11
浮游动物食性 Planktivorous	44.43	28.39	3.87	100	10
底栖动物食性 Benthivorous	44.43	41.44	2.99	100	7

($\hat{y}$)之间的匹配程度,可以间接评估不同食物来源比例的预测效果^[41]。消费者稳定同位素预测值($\hat{y}$)可通过模型中各种营养来源贡献比例和营养来源的稳定同位素来计算获得(公式4)^[42]:

$$\hat{y} = \sum_{n=1}^k f_n \delta_X \quad (4)$$

式中, n 表示消费者使用的第 n 种食物来源, k 是食物来源的数量(本研究中 $k=4$), f 代表通过食物来源分配方法预测的食物来源对消费者的比例贡献。 δ_X 表示食物来源中测得的同位素组成。

结合模型的特点,通常计算一个或多个基于预测值与测量值的指标来进行评价(表3)。例如,均方根误差(RMSE),总结了测得值和预测值之间的平均差异,用来评估预测值的准确程度;较低的RMSE值表明该模型具有较小的误差和更准确的预

测。预测优度统计数据(G)也用于衡量模型的有效性。 G 值为1表示理想的预测。 G 值越接近1,模型的可靠性越高。 G 值为负表示该模型不太可靠。

衡量模型的拟合程度(模型质量好坏),没有固定的标准。例如,MAE和RMSE一样,衡量的是真实值与预测值的偏离的绝对大小情况,需要结合真实值的量纲才能判断差异;而MAPE衡量的是偏离的相对大小(即百分率)。相对来说,MAE和MAPE不容易受极端值的影响;而MSE和RMSE采用误差的平方,会放大预测误差,所以对于离群数据更敏感。MAPE使用百分率来衡量偏离的大小,容易理解和解读。而MAE/RMSE需要结合真实值的量纲才能判断差异。

本研究的模型评价结果表明(表4),蒙古鲌鱼食性功能群、浮游动物食性功能群和底栖动物食性功能群的拟合总体较好($G>0.8$),但3个模型比较

表3 基于预测值与测量值的模型评价方法

Tab. 3 Evaluation methods for the difference between model predicts and observations.

名称Name	全称Full name	缩写Abbreviation	公式Formula	性质Property	含义Meaning	参考文献Reference
最小预测误差	Minimum error	$E_{\min}$	$E_{\min} = \min (\hat{y}_i - y_i)$	$(-\infty, +\infty)$	预测值与真实值之间的最小偏差	[38]
最大预测误差	Maximum error	$E_{\max}$	$E_{\max} = \max (\hat{y}_i - y_i)$	$(-\infty, +\infty)$	预测值与真实值之间的最大偏差	[38]
均方误差	Mean squared error	MSE	$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2$	$[0, +\infty)$	衡量的是预测值与真实值之间的偏差,并且对数据中的异常值较为敏感。预测值与真实值完全吻合时等于0;误差越大,该值越大	[39]
根均方误差	Root mean square error	RMSE	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}$	$[0, +\infty)$	同上。数量级上比MSE较直观,与观测值一致	[39]
标准根均方误差	Normalized root mean square error	NRMSE	$NRMSE = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}}{\max(y_i) - \min(y_i)}$	$[0, 1]$	同上。可用于比较不同尺度观测值直接对模型预测的效果	[39]
平均绝对误差	Mean absolute error	MAE	$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i - y_i $	$[0, +\infty)$	同上。更好地反映预测值误差的实际情况	[39]
平均绝对百分比误差	Mean absolute percentage error	MAPE	$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left \frac{\hat{y}_i - y_i}{y_i} \right $	$[0, +\infty)$	预测值与真实值完全吻合时等于0%,大于100%则表示劣质模型分母部分为零时,不可用	[39]
对称平均绝对百分比误差	Symmetric mean absolute percentage error	SMAPE	$SMAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \frac{ \hat{y}_i - y_i }{(\hat{y}_i + y_i) / 2}$	$[0, +\infty)$	同上	[39]
预测优度	Goodness of prediction	G	$G = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \right]$	$[0, 1]$	G 值为1表示理想的预测。 G 值越接近1,模型的可靠性越高。 G 值为负表示该模型不太可靠	[40]
R	R	R	$R = \sum_{j=1}^{\delta_x} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\hat{y}_{ij} - y_{ij}}{y_{ij}} \right)^2$	$[0, +\infty)$	预测值与真实值完全吻合时等于0;误差越大,该值越大	[40]

表 4 模型预测值与观测值差异评价

Tab. 4 Evaluation of the difference between model predicts and observations

营养聚类 Trophic cluster	最大预测误差 $E_{\max}$	最小预测误差 $E_{\min}$	均方误差 MSE	根均方误差 RMSE	标准根均方误差 NRMSE	平均绝对误差 MAE	平均绝对百分比误差 MAPE	对称平均绝对百分比误差 SMAPE	预测优度 Goodness-of-fit	R
鱼类食性 Piscivorous	1.195	-3.089	2.16	1.47	0.036	1.273	127.3	8.216	0.994	0.198
浮游动物食性 Planktivorous	1.603	-0.492	0.547	0.74	0.019	0.594	59.4	3.377	0.998	0.043
底栖动物食性 Benthivorous	1.602	-2.261	0.938	0.969	0.026	0.732	73.2	4.513	0.997	0.055

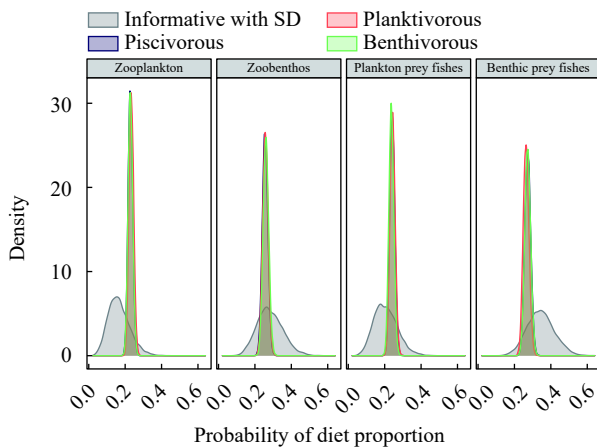


图 5 消费者不同营养功能群营养来源贡献的先验信息与后验信息

Fig. 5 Priori information and posteriori information of trophic groups

看, 鱼食性功能群的拟合模型性能相对较差。不管用哪个指标, 评估模型的好坏都不能够脱离具体的应用场景和具体的数据集。单纯地评判哪个模型好坏, 是基本上没有意义的。

3.3 先验信息与后验信息

贝叶斯混合模型的主要统计数据是消费者营养来源的概率分布, 而不是消费者同位素值的预测, 因此评估混合模型对消费者营养来源贡献估计的后验信息及其受先验信息的影响(图 5)。后验信息与先验信息的本质是营养贡献量的概率分布, 因此可通过信息理论的相关概念和方法进行评价(表 5)。

信息量用来度量一个信息的多少, 而信息熵(Shannon Entropy)则用来描述一个来源信息的不确定度, 也是信息来源的信息量期望^[44]。基于信息理论的方法, 可以衡量不同营养来源概率分布之间的先验信息与后验信息的异同。进一步可评估营养来源数据的改变、消费者功能群的改变和营养来源强度的改变等对消费者营养来源信息确定和解释的影响。例如, 相对熵可以衡量先验信息与后验信息之间的距离, 当先验信息与后验信息分布相同时, 它们的相对熵为零^[43]。在混合模型中, 先验信

息通常较后验信息丰富, 因此当计算KL散度(Kullback-Leibler divergence), 可获得比最大熵更高的信息增益, 即后验与先验信息相差很大时, 就会出现较高的值^[43], 而信息熵则代表了信息增益的有限上界。KL散度(信息增益)增高由后验信息与先验信息不同的均值和置信区间的差异变大决定(后验信息不支持先验信息或者后验信息强烈支持先验信息但置信区间较窄), 因此需结合分布信息图一同解释(图 5)。

本研究依据主要信息理论度量与统计方法, 评估了贝叶斯混合模型的先验信息和后验信息结果(表 6), 先验信息和后验信息不同的信息熵值、不为0的相对熵值及较大的交叉熵值表明贝叶斯混合模型的先验信息和后验信息存在一定程度差异。首先, 估计每个信息源的边际(Marginal)贡献所占的比例, 以反映文献中混合模型是如何解释的(例如大多数混合模型程序的输出包括边际均值和可信度区间)。营养来源1%水平贡献信息测量应在0.01的离散区间内计算。其次, 通过所有来源贡献的联合后验分布计算的, 说明了关于来源相互间有条件依赖的信息增益, 如食性组成权衡, 及边际贡献的变化。我们通过比较食性组成贡献的先验分布和后验分布的样本来计算总体测量值, 并使用The isometric logratio transformation等轴测对数比进行转换^[48]。等轴测对数比率将比例转换为变量, 这些变量根据多元正态分布近似分布, 使我们能够使用2个多元正态分布散度的分析方程来计算信息增益。从概念上来说, 我们可以把等轴测对数比变换看作是将食性组成比例延伸到一个可能有无限边界的坐标空间。等长对数比变换意味着KL散度可以无限增加, 食性组成比例的变化非常微小。因此, 我们在 $\log_2$ 尺度上用KL散度来表示信息增益^[11,37]。

此外, 度量2个概率分布之间的距离, 还有一些其他通用的散度指标可供参考(表 7)。例如Hellinger distance^[49]可量化先验分布和后验分布之间差异。如果先验分布和后验分布在其参数空间中具有相同的密度, 则为零。如果一个分布在任何地方都是

零密度, 而另一个分布是正密度, 那么Hellinger distance为1^[45]。

4 结论

本文综述了在拟合和评估贝叶斯混合模型时遵循的最佳实践(图 6), 及如何直接避免同位素构建消费者营养溯源分析中的诸多技术问题^[9]。种群营养功能群的识别, 有助于减小消费者同位素变异所带来的不确定性^[19, 20]; 营养来源矫正可以避免营养来源和消费者同位素之间的共线性, 及不同营养来源之间的差异水平等情况^[27]; 数据质量检验可以帮助剔除异常数据、提高数据总体质量、检验数据质量是否符合建模需要^[28, 29]。动态的生态系统与消费者相对快速的能量需求调整, 可强烈地影响食物网结构与功能^[50]。因此, 在开展食物网研究前, 需要投入大量的时间和精力进行数据收集和分析,

了解野外调查过程中哪些数据满足了前期的假定条件, 以确保建模分析的准确性^[32]。在尝试数据建模之前, 必须考虑环境中潜在食物来源的丰度、生物量、消费者的摄食行为习性、胃肠含物等重要的先验信息^[33]。完整重现模型选择和模型评价的过程, 是建模、训练、验证、评价的必要条件。模型选择是根据一组不同复杂度的模型表现, 从中挑选最好的模型; 模型评价则是在选择模型后, 评价其预测误差^[11, 37]。根据具体研究, 在实践过程中, 评价指标多种多样, 且分别刻画了相对“真实模型”的信息损失。由于真实模型的未知性, 这些评价仅反应现有模型构建过程中相对较好的性能, 所以具体问题仍需具体分析。

通过侧重于模型预测摄食者同位素值能力的评估方法, 可以判断模型的拟合质量。此外, 鉴于贝叶斯模型的特点, 即如果先验信息误差较低, 则

表 5 主要信息理论度量与统计

Tab. 5 The important information theory measures and statistics

名称Name	全称Full Name	缩写Abbreviation	公式Formula	含义Meaning	参考文献Reference
信息熵	Shannon Entropy 或 Information Entropy	$H(x)$	$H(x) = -\sum_x p(x) \log p(x)$ $= -\sum_{i=1}^n p(x_i) \log p(x_i)$	是一个事件总的信息量, 是每一种可能的情况的信息量乘以它们发生的概率, 即所有可能发生事件所带来的信息量的期望	[43, 44]
联合熵	Joint Entropy	$H(X, Y)$	$H(X, Y) = -\sum_{x, y} p(x, y) \log p(x, y)$ $= -\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m p(x_i, y_j) \log p(x_i, y_j)$	同上, 拓展至多维分布。 $H(X)$ 和 $H(Y)$ 的并集是联合熵 $H(X, Y)$	[43]
条件熵	Conditional Entropy	$H(Y X)$	$H(Y X) = H(X, Y) - H(X)$	描述 X 和 Y 所需的信息是描述 X 自己所需的信息, 加上给定 X 的条件下具体化 Y 所需的额外信息	[43]
互信息	Mutual Information	$I(X, Y)$	$I(X, Y) = H(X) - H(X Y)$ $= H(Y) - H(Y X)$ $= H(X) + H(Y) - H(Y X)$ $= H(X, Y) - H(X Y) - H(Y X)$	亦成为转移信息 (Transinformation), 是两个随机变量间相互依赖性的量度。 $H(X)$ 和 $H(Y)$ 的交集是互信息 $I(X, Y)$	[43]
交叉熵	Cross Entropy	H_{cross}	$H_{\text{cross}}(p, q) = \sum_x p(x) \log \frac{1}{q(x)}$ $= -\sum_x p(x) \log q(x)$	交叉熵用来衡量在给定 X 下, 使用 Y 策略消除系统的不确定性所需要付出成本的大小。值越小, 两个概率分布就越接近	[43]
相对熵-KL 散度	Kullback-Leibler divergence, KLD	D_{KL}	$D_{\text{KL}}(p \parallel q) = \sum_x p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)}$ $= E_{p(x)} \log \frac{p(x)}{q(x)}$ $D_{\text{KL}}(p \parallel q) = H_{\text{cross}}(p, q) - H(p)$	衡量两个概率分布之间的差异“距离”, 反映了用分布 q 的最佳信息传递方式来传达分布 p , 比用分布 p 自己的最佳信息传递方式来传达分布 p , 平均多耗费的信息长度。KL 散度是用于衡量分布之间的差异程度的, 又称信息增益 (Information gain)	[43]
相对熵-JS 散度	Jensen-Shannon divergence	D_{JS}	$D_{\text{JS}}(p \parallel q) = \frac{1}{2} D_{\text{KL}} \left(p \parallel \frac{p+q}{2} \right) + \frac{1}{2} D_{\text{KL}} \left(q \parallel \frac{p+q}{2} \right)$	KL 散度的缺点是它不是距离、不对称。因此引入 JS 散度的概念, 是 KL 散度的变形。JS 散度是对称且非负的, $JSD(P \parallel Q) = JSD(Q \parallel P)$ 。 $JSD = 0$, if and only if $P = Q$	[43]
相对熵-GJS 散度	Generalized Jensen-Shannon Divergence	D_{GJS}	$gJSD_{1, \dots, n}(P_1, \dots, P_n) = H \left(\sum_{i=1}^n i * P_i \right) - \sum_{i=1}^n i * H(P_i)$	同上, 拓展至多维分布	[43]

表 6 先验信息与后验信息的信息理论统计结果

Tab. 6 The important information theory measures and statistics

信息理论 Infomation theory		营养来源 Source	先验信息 Prior. information	鱼类食性 Piscivorous	浮游动物食性 Planktivorous	底栖动物食性 Benthivorous
信息熵	Shannon's Entropy	Zooplankton	12.86205362	14.2564454	14.2564497	14.2563905
		Zoobenthos	12.85236519	14.2560339	14.2561267	14.2560087
		Plankton prey fishes	12.84968762	14.2562204	14.2562049	14.2562201
		Benthic prey fishes	12.85681723	14.2560032	14.2559697	14.2560624
相对熵- KL 散度	Kullback-Leibler Divergence	Zooplankton	—	-0.1795993	-0.1789568	-0.1786544
		Zoobenthos	—	-0.1642057	-0.1642421	-0.1639883
		Plankton prey fishes	—	-0.1654721	-0.1650742	-0.1654557
		Benthic prey fishes	—	-0.1682989	-0.1680717	-0.1677031
相对熵 -JS散度	Jensen-Shannon Divergence	Zooplankton	—	0.1387041	0.1391457	0.1390174
		Zoobenthos	—	0.1409801	0.1410425	0.1412026
		Plankton prey fishes	—	0.1412871	0.141212	0.1412597
		Benthic prey fishes	—	0.1400291	0.140179	0.1399777
相对熵 -GJS散度	Generalized Jensen-Shannon Divergence	Zooplankton	—	0.1387041	0.1391457	0.1390174
		Zoobenthos	—	0.1409801	0.1410425	0.1412026
		Plankton prey fishes	—	0.1412871	0.141212	0.1412597
		Benthic prey fishes	—	0.1400291	0.140179	0.1399777
交叉熵	Cross Entropy	Zooplankton	—	12.6824543	12.6830969	12.6833992
		Zoobenthos	—	12.6881595	12.6881231	12.6883769
		Plankton prey fishes	—	12.6842155	12.6846134	12.6842319
		Benthic prey fishes	—	12.6885184	12.6887455	12.6891141
互信息	Mutual Information	Zooplankton	—	12.8620536	12.8620536	12.8620536
		Zoobenthos	—	12.8523652	12.8523652	12.8523652
		Plankton prey fishes	—	12.8496876	12.8496876	12.8496876
		Benthic prey fishes	—	12.8568172	12.8568172	12.8568172

表 7 概率分布相似度评价的几种距离法

Tab. 7 Some distance methods to evaluate similarity of probabilistic distribution

全称Full Name	缩写 Abbreviation	公式Formula	含义Meaning	参考文献 Reference
海灵格距离 Hellinger distance	HD	$H^2(P, Q) = \frac{1}{2} \int (\sqrt{dP} - \sqrt{dQ})^2$	海灵格距离计算先验和后验之间的无单位差。这样做，它获得了一些可解释性，因为它的最大值是1。海灵格距离对于确定准确描述摄食者食性组成所需的样本量非常有用	[45]
最大平均差异 Maximum mean discrepancy	MMD	$MMD[\mathcal{F}, X, Y] = \left[\frac{1}{m^2} \sum_{i,j=1}^m k(x_i, x_j) - \frac{2}{mn} \sum_{i,j=1}^{m,n} k(x_i, y_j) + \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n k(y_i, y_j) \right]^{\frac{1}{2}}$	基于两个分布的样本，通过寻找在样本空间上的映射函数K，求不同分布的样本在K上的函数值的均值，通过把两个均值作差可以得到两个分布对应于K的mean discrepancy。寻找一个K使得这个mean discrepancy有最大值，就得到了MMD。最后取MMD作为检验统计量（test statistic），从而判断两个分布是否相同。如果这个值足够小，就认为两个分布相同，否则就认为它们不相同。更加简单的理解就是：求两堆数据在高维空间中的均值的距离	[46]
瓦瑟斯坦距离 Wasserstein distance	WD	$WORK(P, Q, F) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n d_{ij} f_{ij}$	衡量了把数据从分布p“移动成”分布q时所需要移动的平均距离的最小值，不仅给出了距离的度量，而且给出如何把一个分布变换为另一分布的转移方案	[47]

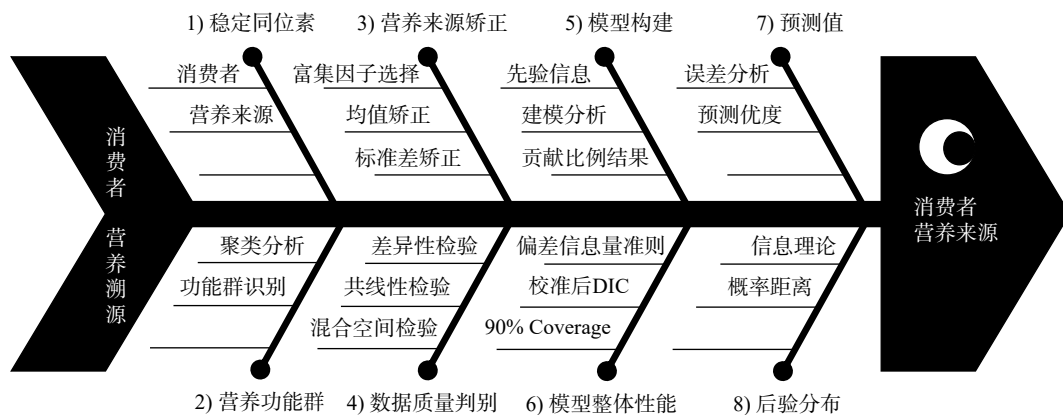


图6 模型构建与性能评估流程图

Fig. 6 Fishbone diagram of quantifying the quality of model construction and prediction

信息混合模型的后验分布趋同于先验信息, 进一步进行了基于信息理论和概率距离统计方法的评估, 为同位素混合模型的输出结果的质量提供互补的评估方法^[37]。这些方法的综合运用, 将进一步提高消费者营养溯源准确性, 为更深刻地认识食物网规律提供科学支撑^[11, 37]。

参考文献:

- [1] Vander Zanden M J V, Rasmussen J B. Variation in $\delta^{15}\text{N}$ and $\delta^{13}\text{C}$ trophic fractionation: Implications for aquatic food web studies [J]. *Limnology and Oceanography*, 2001, **46**(8): 2061-2066.
- [2] Boecklen W J, Yarnes C T, Cook B A, et al. On the use of stable isotopes in trophic ecology [J]. *Annual Review of Ecology, Evolution and Systematics*, 2011, **42**(1): 411-440.
- [3] Xu J, Xie P. Studies on the food web structure of Lake Donghu using stable carbon and nitrogen isotope ratios [J]. *Journal of Freshwater Ecology*, 2004, **19**(4): 645-650.
- [4] Xu J, Zhou Q, Zeng Q F, et al. Stable Carbon and Nitrogen Isotopes in Aquatic Ecology: Theory and Applications [M]/Duan C Q. *Advances in Ecological Sciences* Vol. 5. Beijing: Higher Education Press, 2010: 35-80. [徐军, 周琼, 曾庆飞, 等. 碳、氮稳定同位素技术及其在水域生态学研究中的应用 [M]/段昌群. 生态科学进展. 第5卷. 北京: 高等教育出版社, 2010: 35-80.]
- [5] Xu J, Xie P, Zhang M, et al. Icefish (*Salangidae*) as an indicator of anthropogenic pollution in freshwater systems using nitrogen isotope analysis [J]. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 2007, **79**(3): 323-326.
- [6] Phillips D L, Koch P L. Incorporating concentration dependence in stable isotope mixing models [J]. *Oecologia*, 2002, **130**(1): 114-125.
- [7] Xu J, Zhang M, Xie P. Size-related shifts in reliance on benthic and pelagic food webs by lake anchovy [J]. *Ecology*, 2007, **14**(2): 170-177.
- [8] Xu J, Zhang M, Xie P. Stable isotope changes in freshwater shrimps (*Exopalaemon modestus* and *Macrobrachium nipponensis*): trophic pattern implications [J]. *Hydrobiologia*, 2008, **605**(1): 45-54.
- [9] Phillips D L, Inger R, Bearhop S, et al. Best practices for use of stable isotope mixing models in food-web studies [J]. *Canadian Journal of Zoology*, 2014, **92**(10): 823-835.
- [10] Layman C A, Araujo M S, Boucek R, et al. Applying stable isotopes to examine food - web structure: an overview of analytical tools [J]. *Biological Reviews*, 2012, **87**(3): 545-562.
- [11] Swan G J F, Bearhop S, Redpath S M, et al. Evaluating Bayesian stable isotope mixing models of wild animal diet and the effects of trophic discrimination factors and informative priors [J]. *Methods in Ecology and Evolution*, 2020, **11**(1): 139-149.
- [12] Li B, Wang Z J, Jin L, et al. Study on diet shift of *Erythrourter mongolicus mongolicus* with stable isotope technology [J]. *Journal of Fisheries of China*, 2011, **35**(9): 1419-1425. [李斌, 王志坚, 金丽, 等. 蒙古鲈食性转变的稳定性同位素研究 [J]. 水产学报, 2011, **35**(9): 1419-1425.]
- [13] Xu J, Wang Y Y, Wang K, et al. Protocols for sample collection, pretreatment and preservation of aquatic organisms in stable isotope ecology [J]. *Acta Hydrobiologica Sinica*, 2020, **44**(5): 989-997. [徐军, 王玉玉, 王康, 等. 水域生态学中生物稳定同位素样品采集、处理与保存 [J]. 水生生物学报, 2020, **44**(5): 989-997.]
- [14] Tan P N, Steinbach M, Karpatne A, et al. Introduction to Data Mining [M]. Boston: Pearson Addison Wesley, 2006: 534-553.
- [15] Kanungo T, Mount D M, Netanyahu N S, et al. An efficient k-means clustering algorithm: analysis and implementation [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis Machine Intelligence*, 2002, **24**(7): 881-892.
- [16] Xu J, Wen Z, Ke Z, et al. Contrasting energy pathways at the community level as a consequence of regime shifts

- [J]. *Oecologia*, 2014, **175**(1): 231-241.
- [17] Xu J, Zhang H, Cai Y, *et al.* Optimal response to habitat linkage of local fish diversity and mean trophic level [J]. *Limnology and Oceanography*, 2016, **61**(4): 1438-1448.
- [18] Xu J, Zhang M. Primary consumers as bioindicator of nitrogen pollution in lake planktonic and benthic food webs [J]. *Ecological Indicators*, 2012, **14**(1): 189-196.
- [19] Xu J. Ecological studies on the food webs structures and trophic relationships of freshwater lakes in China using stable carbon and nitrogen isotopes [D]. Wuhan: Institute of Hydrobiology, Chinese Academy of Sciences, 2005: 63-72. [徐军. 应用碳、氮稳定性同位素探讨淡水湖泊的食物网结构和营养级关系 [D]. 武汉: 中国科学院水生生物研究所, 2005: 63-72.]
- [20] Xu J, Zhang M, Xie P. Variability of stable nitrogen isotopic baselines and its consequence for trophic modeling [J]. *Journal of Lake Sciences*, 2010, **22**(1): 8-20. [徐军, 张敏, 谢平. 氮稳定同位素基准的可变性及对营养级评价的影响 [J]. 湖泊科学, 2010, **22**(1): 8-20.]
- [21] Bond A L, Diamond A W. Recent Bayesian stable - isotope mixing models are highly sensitive to variation in discrimination factors [J]. *Ecological Applications*, 2011, **21**(4): 1017-1023.
- [22] Rio C M N D, Wolf N, Carleton S A, *et al.* Isotopic ecology ten years after a call for more laboratory experiments [J]. *Biological Reviews*, 2009, **84**(1): 91-111.
- [23] Kurle C M, Koch P L, Tershy B R, *et al.* The effects of sex, tissue type, and dietary components on stable isotope discrimination factors ($\Delta^{13}\text{C}$ and $\Delta^{15}\text{N}$) in mammalian omnivores [J]. *Isotopes in Environmental Health Studies*, 2014, **50**(3): 307-321.
- [24] Fry B. Stable Isotope Ecology [M]. New York: Springer, 2006: 1-308.
- [25] Post D M. Using stable isotopes to estimate trophic position: models, methods, and assumptions [J]. *Ecology*, 2002, **83**(3): 703-718.
- [26] Szpak P, Metcalfe J Z, Macdonald R A. Best practices for calibrating and reporting stable isotope measurements in archaeology [J]. *Journal of Archaeological Science: Reports*, 2017(13): 609-616.
- [27] Hopkins J B, Ferguson J M, Tyers D B, *et al.* Selecting the best stable isotope mixing model to estimate grizzly bear diets in the Greater Yellowstone Ecosystem [J]. *PLoS One*, 2017, **12**(5): e0174903.
- [28] Smith J A, Mazumder D, Suthers I M, *et al.* To fit or not to fit: Evaluating stable isotope mixing models using simulated mixing polygons [J]. *Methods in Ecology and Evolution*, 2013, **4**(7): 612-618.
- [29] Fry B. Alternative approaches for solving underdetermined isotope mixing problems [J]. *Marine Ecology Progress Series*, 2013(472): 1-13.
- [30] McCarthy M A, Masters P. Profiting from prior information in Bayesian analyses of ecological data [J]. *Journal of Applied Ecology*, 2005, **42**(6): 1012-1019.
- [31] Kuhnert P M, Martin T G, Griffiths S P. A guide to eliciting and using expert knowledge in Bayesian ecological models [J]. *Ecology Letters*, 2010, **13**(7): 900-914.
- [32] Choy S L, O'leary R, Mengersen K. Elicitation by design in ecology: using expert opinion to inform priors for Bayesian statistical models [J]. *Journal of Ecology*, 2009, **90**(1): 265-277.
- [33] Votier S C, Bearhop S, McCormick A, *et al.* Assessing the diet of great skuas, *Catharacta skua*, using five different techniques [J]. *Polar Biology*, 2003, **26**(1): 20-26.
- [34] Chiaradia A, Forero M G, McInnes J C, *et al.* Searching for the true diet of marine predators: Incorporating bayesian priors into stable isotope mixing models [J]. *PLoS One*, 2014, **9**(3): e92665.
- [35] Parnell A. Simmr: a stable isotope mixing model [J]. <https://github.com/andrewcparnell/simmr>, 2016.
- [36] Meyer R. Deviance Information Criterion (DIC) [M]//Balakrishnan N, Colton T, Everitt B, *et al.* (Eds.), Wiley StatsRef: Statistics Reference Online: Wiley, 2016: 1-6.
- [37] Brown C J, Brett M T, Adame M F, *et al.* Quantifying learning in biotracer studies [J]. *Oecologia*, 2018, **187**(3): 597-608.
- [38] Li J, Heap A D. A review of comparative studies of spatial interpolation methods in environmental sciences: Performance and impact factors [J]. *Ecological Informatics*, 2011, **6**(3-4): 228-241.
- [39] Shcherbakov M, Brebels A, Shcherbakova N L, *et al.* A survey of forecast error measures [J]. *World Applied Sciences Journal*, 2013, **24**(24): 171-176.
- [40] Cramer V A, Thorburn P J, Fraser G W. Transpiration and groundwater uptake from farm forest plots of *Casuarina glauca* and *Eucalyptus camaldulensis* in saline areas of southeast Queensland, Australia [J]. *Agricultural Water Management*, 1999, **39**(23): 187-204.
- [41] Parnell A C, Phillips D L, Bearhop S, *et al.* Bayesian stable isotope mixing models [J]. *Environmetrics*, 2013, **24**(6): 387-399.
- [42] Ehleringer J R, Dawson T E. Water uptake by plants: perspectives from stable isotope composition [J]. *Plant, Cell & Environment*, 1992, **15**(9): 1073-1082.
- [43] Kullback S. Information Theory and Statistics [M]. London: Chapman and Hall, 1959: 36-69.
- [44] Shannon C E. A mathematical theory of communication [J]. *Bell System Technical Journal*, 1948, **27**(3): 379-423.
- [45] Gibbs A L, Su F E. On Choosing and bounding probability metrics [J]. *International Statistical Review*, 2002, **70**(3): 419-435.
- [46] Sriperumbudur B K, Fukumizu K, Gretton A, *et al.* Non-parametric Estimation of Integral Probability Metrics [C]. International Symposium on Information Theory. 2010: 1428-1432.
- [47] Panaretos V M, Zemel Y. Statistical Aspects of Wasser-

- stein Distances [J]. *Annual Review of Statistics and Its Application*, 2019, **6**(1): 405-431.
- [48] Egozcue J J, Pawlowsky-Glahn V, Mateu-Figueras G, *et al.* Isometric logratio transformations for compositional data analysis [J]. *Mathematical Geology*, 2003, **35**(3): 279-300.
- [49] Kailath T. The Divergence and bhattacharyya distance measures in signal selection [J]. *IEEE Transactions on Communications*, 1967, **15**(1): 52-60.
- [50] Mccann K S, Rasmussen J B, Umbanhowar J. The dynamics of spatially coupled food webs [J]. *Ecology Letters*, 2005, **8**(5): 513-523.

STABLE ISOTOPE MIXING MODEL EVALUATION: QUANTIFYING THE QUALITY OF PREDICTIONS

ZHU Kong-Hao¹, LI Bin², WANG Kang¹, GUO Yu-Lun¹, WANG Wei-Kang³ and XU Jun¹

(1. *Institute of Hydrobiology, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430072, China*; 2. *Neijiang Normal University, Neijiang 430072, China*; 3. *Shenzhen Liyuan Water Design Consulting Co., Ltd, Shenzhen 528031, China*)

Abstract: Stable isotope technique is of importance to study the ecology of food webs. Based on stable isotope mixing model of mass balance, stable isotope technology can be used for consumer nutrition traceability, that is, to determine the contribution of multiple sources of nutrition to the consumer. Stable isotope mixing model of mass balance has been one of the necessary methods for the traceability analysis of consumer nutrition sources. Bayesian mixing models are often used to estimate the contribution of different sources of nutrition. Such models provide probabilistic distribution characteristics of each nutrient source's contribution to the consumer. However, the result of mixing model fitting and its matching level with the actual ecology theory are important evaluation contents of model performance. In order to ensure the accuracy of the modeling analysis, the modeling data must be corrected and verified first. Second, before data modeling, important prior information must be considered. Furthermore, the process of model selection and model evaluation for complete reproduction is a necessary condition for modeling, training, verification and evaluation. Model selection is to select the best model based on a set of model representations with different complexities and model evaluation is to evaluate the predicted error after selecting the model. According to the specific research, there are various evaluation indexes in practice, and the information loss of the relative "real model" is described respectively. Due to the unknown nature of the real model, these evaluations only reflect the relatively good performance of existing models in the construction process, so specific problems still need to be analyzed. Based on the measured isotope data set (isotope data set for *Culter mongolicus mongolicus*), this paper constructed a series of Bayesian models by identifying the characteristics of consumer nutrition functional groups and changing the a priori information characteristics of nutritional sources; and described the methods and processes of model performance evaluation by comparing the overall performance of the model, the difference between measured and predicted values, and the difference between prior and post-test information, so as to provide a model performance evaluation system for the application of stable isotope technology to carry out consumer nutrition traceability research. The fit quality of the model can be judged by the evaluation method, which focuses on the model's ability to predict consumer isotope values. In addition, in view of the characteristics of the Bayesian mixing model, that is, if a priori information error is low, the mixed posterior distribution information of the model will converge to a priori information, and further evaluation will be based on information theory and probability distance statistical method to provide complementary assessment method for the quality of the output for the isotopic mixture model. The integrated use of these methods further improves the consumer nutrition source accuracy, and provides a scientific support for a more profound understanding of the food web laws. This paper reviews the best practices for fitting and evaluating Bayesian mixing model, and how to directly avoid many technical issues involved in isotope construction in consumer nutrition traceability analysis.

Key words: Food webs; Stable isotopes; Bayesian models; Model performance; Consumer