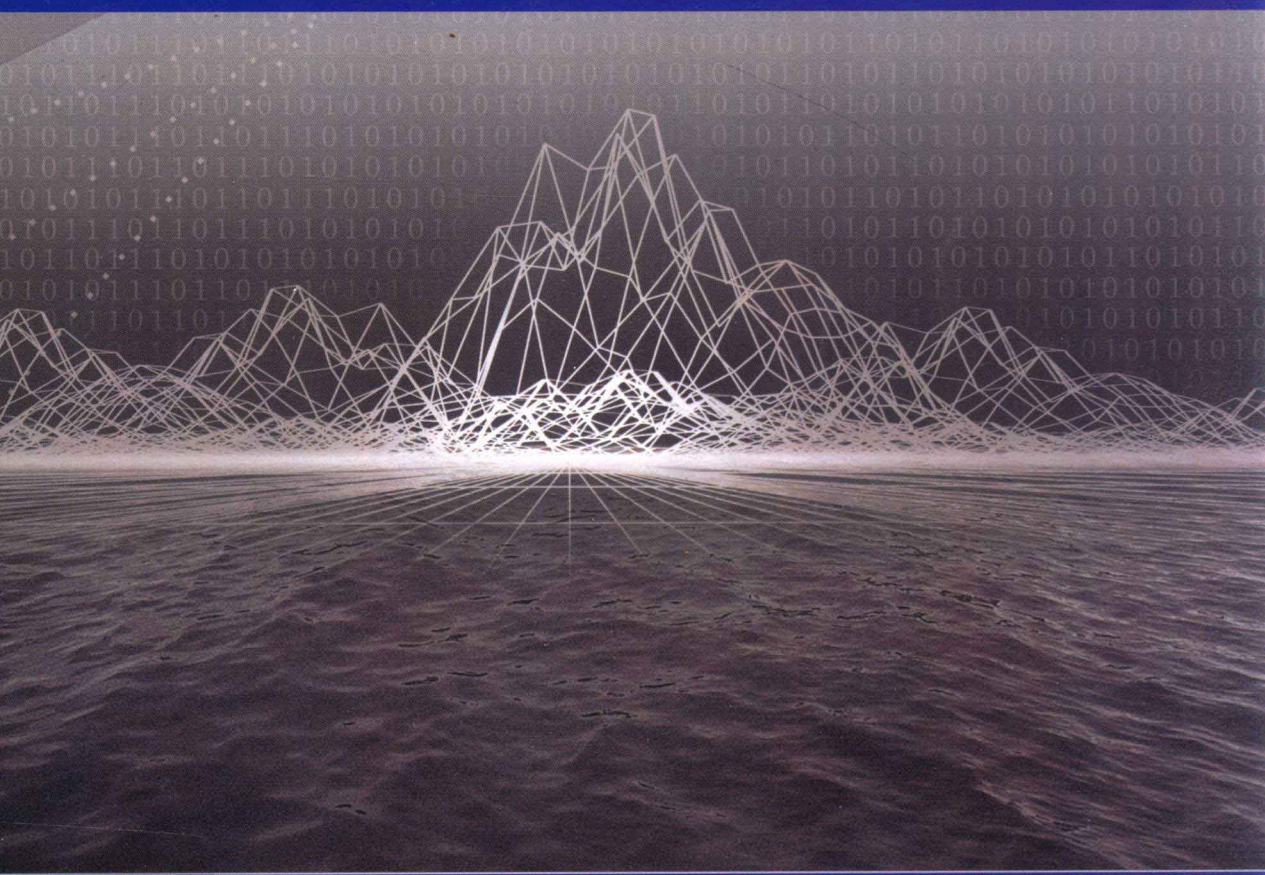


The Application and Research
of Mathematical Model
in Ecology

24

数学模型在生态学 的应用及研究

杨东方 苗振清 编著



海洋出版社

数学模型在生态学的应用及研究(24)

The Application and Research of Mathematical Model in Ecology(24)

杨东方 苗振清 编著

海洋出版社

2013 年 · 北京

内 容 提 要

通过阐述数学模型在生态学的应用和研究, 定量化地展示生态系统中环境因子和生物因子的变化过程, 揭示生态系统的规律和机制以及其稳定性、连续性的变化, 使生态数学模型在生态系统中发挥巨大作用。在科学技术迅猛发展的今天, 通过该书的学习, 可以帮助读者了解生态数学模型的应用、发展和研究的过程; 分析不同领域、不同学科的各种各样生态数学模型; 探索采取何种数学模型应用于何种生态领域的研究; 掌握建立数学模型的方法和技巧。此外, 该书还有助于加深对生态系统的量理解, 培养定量化研究生态系统的思维。

本书主要内容为: 介绍各种各样的数学模型在生态学不同领域的应用, 如在地理、地貌、水文和水动力以及环境变化、生物变化和生态变化等领域的应用。详细阐述了数学模型建立的背景、数学模型的组成和结构以及其数学模型应用的意义。

本书适合气象学、地质学、海洋学、环境学、生物学、生物地球化学、生态学、陆地生态学、海洋生态学和海湾生态学等有关领域的科学工作者和相关学科的专家参阅, 也适合高等院校师生作为教学和科研的参考。

图书在版编目(CIP)数据

数学模型在生态学的应用及研究. 24/ 杨东方, 苗正清编著. —北京: 海洋出版社, 2013. 8
ISBN 978 - 7 - 5027 - 8609 - 0

I. ①数… II. ①杨… ②苗… III. ①数学模型 - 应用 - 生态学 - 研究 IV. ①Q14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 148473 号

责任编辑: 方 菁

责任印制: 赵麟苏

海洋出版社 出版发行

<http://www.oceanpress.com.cn>

北京市海淀区大慧寺路 8 号 邮编: 100081

北京华正印刷有限公司印刷 新华书店北京发行所经销

2013 年 8 月第 1 版 2013 年 8 月第 1 次印刷

开本: 787 mm × 1092 mm 1/16 印张: 20

字数: 480 千字 定价: 60.00 元

发行部: 62132549 邮购部: 68038093 总编室: 62114335

海洋版图书印、装错误可随时退换

《数学模型在生态学的应用及研究(24)》编委会

主 编 杨东方 苗振清

副主编 葛红光 陈 豫 闵锁田 杨和福 常彦祥

编 委 (按姓氏笔画为序)

王伶俐 王彦民 邓 婕 冯志纲 史 娟

刘 瑾 刘智峰 孙静亚 汤 波 宋凤敏

李 琛 李 晨 杨丹枫 徐焕志 常彦祥

数学是结果量化的工具

数学是思维方法的应用

数学是研究创新的钥匙

数学是科学发展的基础

杨东方

要想了解动态的生态系统的基本过程和动力学机制,尽可从建立数学模型为出发点,以数学为工具,以生物为基础,以物理、化学、地质为辅助,对生态现象、生态环境、生态过程进行探讨。

生态数学模型体现了在定性描述与定量处理之间的关系,使研究展现了许多妙不可言的启示,使研究进入更深的层次,开创了新的领域。

杨东方

摘自《生态数学模型及其在海洋生态学应用》

海洋科学,2000,24(6):21-24.

前 言

细大尽力,莫敢怠荒,远迹辟隐,专务肃庄,端直敦忠,事业有常。

——《史记·秦始皇本纪》

数学模型研究可以分为两大方面:定性和定量的,要定性的研究,提出的问题是:“发生了什么?或者发生了没有?”,要定量的研究,提出的问题是:“发生了多少?或者它如何发生的?”前者是对问题的动态周期、特征和趋势进行了定性的描述,而后者是对问题的机制、原理、起因进行了定量化的解释。然而,生物学中有许多实验问题与建立模型并不是直接有关的。于是,通过分析、比较、计算和应用各种数学方法,建立反映实际的且具有意义的仿真模型。

生态数学模型的特点为:(1)综合考虑各种生态因子的影响。(2)定量化描述生态过程,阐明生态机制和规律。(3)能够动态地模拟和预测自然发展状况。

生态数学模型的功能为:(1)建造模型的尝试常有助于精确判定所缺乏的知识和数据,对于生物和环境有进一步定量了解。(2)模型的建立过程能产生新的想法和实验方法,并缩减实验的数量,对选择假设有所取舍,完善实验设计。(3)与传统的方法相比,模型常能更好地使用越来越精确的数据,将从生态的不同方面所取得的材料集中在一起,得出统一的概念。

模型研究要特别注意:(1)模型的适用范围:时间尺度、空间距离、海域大小、参数范围。例如,不能用每月的个别发生的生态现象来检测1年跨度的调查数据所做的模型。又如用不常发生的赤潮的赤潮模型来解释经常发生的一般生态现象。因此,模型的适用范围一定要清楚。(2)模型的形式是非常重要的,它揭示内在的性质、本质的规律,来解释生态现象的机制、生态环境的内在联系。因此,重要的是要研究模型的形式,而不是参数,参数是说明尺度、大小、范围而已。(3)模型的可靠性,由于模型的参数一般是从实测数据得到的,它的可靠性非常重要,这是通过统计学来检测。只有可靠性得到保证,才能用模型说明实际的生态问题。(4)解决生态问题时,所提出的观点,不仅从数学模型支持这一观点,还要从生态现象、生态环境等各方面的事实来支持这一观点。

本书以生态数学模型的应用和发展为研究主题,介绍数学模型在生态学不同领域的应用,如在地理、地貌、气象、水文和水动力以及环境变化、生物变化和生态变化等领域的应用。详细阐述了数学模型建立的背景、数学模型的组成和结构以及其数学模型应用的意义。认真掌握生态数学模型的特点和功能以及注意事项。生态数学模型展示了生态系统的演化过程,预测了自然资源可持续利用。通过本书的学习和研究,促进自然资源、环境的开发与保护,推进生态经济的健康发展,加强生态保护和环境恢复。

本书是在陕西理工学院出版基金、浙江海洋学院出版基金、浙江海洋学院承担的“舟山渔场渔业生态环境研究与污染控制技术开发”和“近海水域预防环境污染养殖模型”项目、海洋渔业科学与技术(浙江省“重中之重”建设学科)和“近海水域预防环境污染养殖模型”项目、国家海洋局北海环境监测中心主任科研基金——长江口、胶州湾及其附近海域的生态变化过程(05EMC16)的共同资助下完成的。

此书得以完成应该感谢北海环境监测中心崔文林主任和上海海洋大学的李家乐院长;还要感谢刘瑞玉院士、冯士筭院士、胡敦欣院士、唐启升院士、汪品先院士、丁德文院士和张经院士。诸位专家和领导给予的大力支持,提供良好的研究环境,成为我们科研事业发展的动力引擎。在此书付梓之际,我们诚挚感谢给予许多热心指点和有益传授的其他老师和同仁。

本书内容新颖丰富,层次分明,由浅入深,结构清晰,布局合理,语言简练,实用性和指导性强。由于作者水平有限,书中难免有疏漏之处,望广大读者批评指正。

沧海桑田,日月穿梭。抬眼望,千里尽收,祖国在心间。

杨东方 苗振清

2012年8月7日

目 次

酸碱酶的稳定性识别计算	(1)
组氨酸激酶的同源模型	(4)
厌氧氨氧化菌的温度效应计算	(6)
胆红素的吸附性能公式	(8)
小鼠睾丸的支持细胞培养公式	(10)
丁酸梭菌的产氢量计算	(12)
类原球茎的悬浮培养模型	(14)
木材的酶解糖化公式	(16)
代谢流量的比率计算	(19)
细胞内的酶活计算	(23)
聚球藻的碳和能量代谢公式	(25)
二级结构氨基酸的组成公式	(28)
毛棉籽油合成生物柴油的模型	(30)
过氧化氢诱导膜透性的计算	(33)
无血清悬浮的细胞培养模型	(35)
脂肪酶的荧光与活性计算	(39)
培养细胞的葡萄糖控制模型	(41)
双底物的酶促反应模型	(43)
生物转化共轭亚油酸的速度模型	(46)
乙醇连续发酵过程的振荡过程与稳态过程的动力学	(49)
甜高粱乙醇的发酵模型	(52)
螺旋藻富集效率的计算	(55)
乙酸的物料平衡模型	(57)
苯二甲酸的降解模型	(59)
反应器内培养液的氧平衡方程	(62)
木糖醇浓度的适应度函数	(64)
穿膜的传质模型	(66)
过氧化物酶的酶促反应模型	(71)

发酵过程的参数计算	(73)
杂交瘤细胞的代谢流量模型	(75)
反应器的丝网间氧传递模型	(84)
西洋参的细胞培养模型	(90)
洁霉素糖消耗速率的预测模型	(92)
柠檬酸的发酵模型	(97)
土霉素发酵生产后期模型化	(102)
精氨酸的发酵模型	(105)
面包酵母细胞的循环模型	(109)
动物细胞的氧传递速率计算	(111)
发酵过程的滤波模型	(114)
云芝菌丝体悬浮液的流变公式	(118)
“三位一体”评价模型	(121)
板鸭加工的质量模型	(123)
蔬菜污染指数及监测模型	(125)
水泵的能耗公式	(128)
土地利用及生态价值的计算	(134)
工程车辆的传动系统模型	(137)
非点源污染负荷的自记忆模型	(141)
辣椒素的类物质计算	(145)
麦草的热失重公式	(147)
履带车辆的转向驱动公式	(152)
猕猴桃切片的干燥优化计算	(160)
棉纤维根数的测量公式	(163)
圆形隧洞的均匀流与临界流方程	(166)
塑料薄膜的透光率面积比公式	(170)
风力发电机的有效功率计算	(172)
水泵的系统动力模型	(174)
黑切牛肉的发生率计算	(178)
齿轮泵卸荷面积的仿真模型	(180)
农产品加工创新的指标公式	(186)
鱼病案例的算法公式	(189)
无压灌溉番茄的高产计算	(191)

控制排水的粒子群模型	(194)
铲刀臂的运动方程	(198)
太阳能集热器的采热面积计算	(201)
茶叶抖筛机的优化设计模型	(203)
乙酰胆碱酯酶的活力及抑制公式	(208)
日光温室的温度模拟公式	(210)
重金属的多尺度套合模型	(213)
水稻栽植臂的运动公式	(216)
臭氧发生器的产量计算	(218)
畦灌施肥的性能评价公式	(220)
红壤的坡面侵蚀预测模型	(223)
棉花施肥的管理决策系统模型	(226)
纤维素的结晶度公式	(228)
土壤有机质的高光谱反演模型	(230)
流化床的开孔率公式	(232)
砂金矿的土壤退化模型	(234)
土壤有机碳的空间格局计算	(239)
芒果的贮藏公式	(242)
横流干燥的控制预测模型	(245)
高二氧化碳浓度对植物光合作用影响模型	(250)
玉米发育期的积温公式	(253)
羊草叶片气孔的导度模型	(257)
草地火行为的预测模型	(261)
湿地松的适宜密度公式	(264)
杉木年轮的时间序列模型	(267)
落叶松林的生产力模型	(271)
大气硫化化合物的干沉降模型	(274)
森林蒸散的测算模型	(278)
各海拔植物群落的多样性模型	(281)
峨嵋冷杉的树体分形结构模型	(285)
淀粉/聚乙烯醇膜吸水率及抑菌率的计算	(287)
塑料增塑剂的迁移量计算	(289)
遥感数据的植被指数计算	(292)

萝卜棵间的土壤蒸发公式 (294)

抗倒伏性能的力学分析模型 (297)

粮虫的可拓分类公式 (301)

酸碱酶的稳定性识别计算

1 背景

近年来,对极端微生物研究日益升温,嗜酸菌和嗜碱菌就是其中重要的极端微生物类群。尽管嗜酸和嗜碱菌生长于酸性和碱性环境中,但其细胞内部的 pH 却接近中性,细胞内酶反应和生化代谢过程也与中性菌相似,而只有它们产生的胞外酶由于处在酸性或碱性环境中而成为酸性酶和碱性酶^[1-2]。因此,寻找嗜酸和嗜碱菌并分离其酸性和碱性酶是当前研究的重点,研究获得了序列相同性小于 30% 的嗜酸酶和嗜碱酶序列共计 216 条^[3],较系统地分析了二者在氨基酸组成上的差异,初步探讨了其稳定性机制,并发展了一种简单的加权氨基酸组成方法对嗜酸酶和嗜碱酶进行识别,取得了较好的识别效果。

2 公式

2.1 加权氨基酸组成

研究利用加权氨基酸组成对酸性酶和碱性酶进行识别,具体步骤为:① 分别计算酸性酶和碱性酶每条序列氨基酸组成,分别记为 $Comp_{i,AC}$ 和 $Comp_{i,AK}$,式中, i 表示 20 种氨基酸,AC 和 AK 分别表示酸性酶和碱性酶;② 计算酸性酶和碱性酶 20 种氨基酸组成的平均值, $\overline{Comp_{i,AK}}$ 和 $\overline{Comp_{i,AC}}$;③ 计算酸性酶和碱性酶氨基酸组成差异,记为权值

$$W_i = Comp_{i,AK} - Comp_{i,AC} \quad (1)$$

④ 对于某种酶 X ,先计算其氨基酸组成,然后计算其加权氨基酸组成

$$W_{Comp_i} = W_i \times Comp_{i,X} \quad (2)$$

⑤ 对加权氨基酸组成进行求和

$$\delta_{Comp_i} = \sum_{i=1}^{20} W_{Comp_i} \quad (3)$$

若 $\delta_{Comp_i} > 0$,则预测为碱性酶,反之为酸性酶。

2.2 识别效果评估

识别效果通过以下 4 个参数进行描述:敏感性 (Sensitivity, SE), 特异性 (Specificity, SP), 准确率 (Accuracy, ACC) 和 Matthew 相关系数 (Matthew's correlation coefficient, MCC)。计算方法见式(4)至式(7)。

$$SE = TP / (TP + FN) \quad (4)$$

$$SP = TN / (TN + EP) \quad (5)$$

$$ACC = (TP + TN) / (TP + FP + TN + FN) \quad (6)$$

$$MCC = \frac{(TP \times TN) - (FP \times FN)}{\sqrt{(TP + FN) \times (TN + EP) \times (TP + FP) \times (TN + FN)}} \quad (7)$$

式中, TP 为真阳性, 指碱性酶被预测为碱性酶; FN 为假阴性, 指碱性酶被预测为酸性酶; TN 为真阴性, 指酸性酶被预测为酸性酶; FP 为假阳性, 指酸性酶被预测为碱性酶。

2.3 酸性酶和碱性酶氨基酸组成分析

酸性酶和碱性酶氨基酸组成与平均值之间的偏差 (Deviation) 计算如下:

$$D_i = \frac{\overline{Comp_i} - \overline{Comp_i}}{\overline{Comp_i}} \quad (8)$$

式中, $\overline{Comp_i}$ 表示蛋白质分子氨基酸组成。酸性酶和碱性酶氨基酸组成与平均值之间的偏差如图 1 所示。

3 意义

利用加权氨基酸组成对酸性酶和碱性酶进行识别, 提供了一个基于序列识别酸性酶和碱性酶的新方法。本研究较系统地研究了这两类酶, 以期能寻找一些共性的机制, 其结构与功能的研究对中性酶的改造也具有重要的指导意义; 在实际应用中, 可利用此方法对数据库中的酶蛋白序列进行识别, 尤其是未知来源的蛋白序列 (如来源于宏基因组的蛋白序列), 有利于提高对数据库中酶蛋白性质进行注释的效率, 而且它可在提高酶蛋白的酸、碱稳定性所进行的分子改造过程中, 提高效率, 同时增加改造成功率。

参考文献

- [1] 张洪勋, 郝春博, 白志辉. 嗜酸菌研究进展. 微生物学杂志, 2006, 26(2): 68 - 72.
- [2] Horikoshi K. Alkaliphiles: some applications of their products for biotechnology. Microbiol Mol Biol Rev, 1999, 63: 735 - 750.
- [3] 张光亚, 高嘉强, 方柏山. 酸性和碱性酶稳定性机制及其识别. 生物工程学报, 2009, 25(1): 95 - 100.

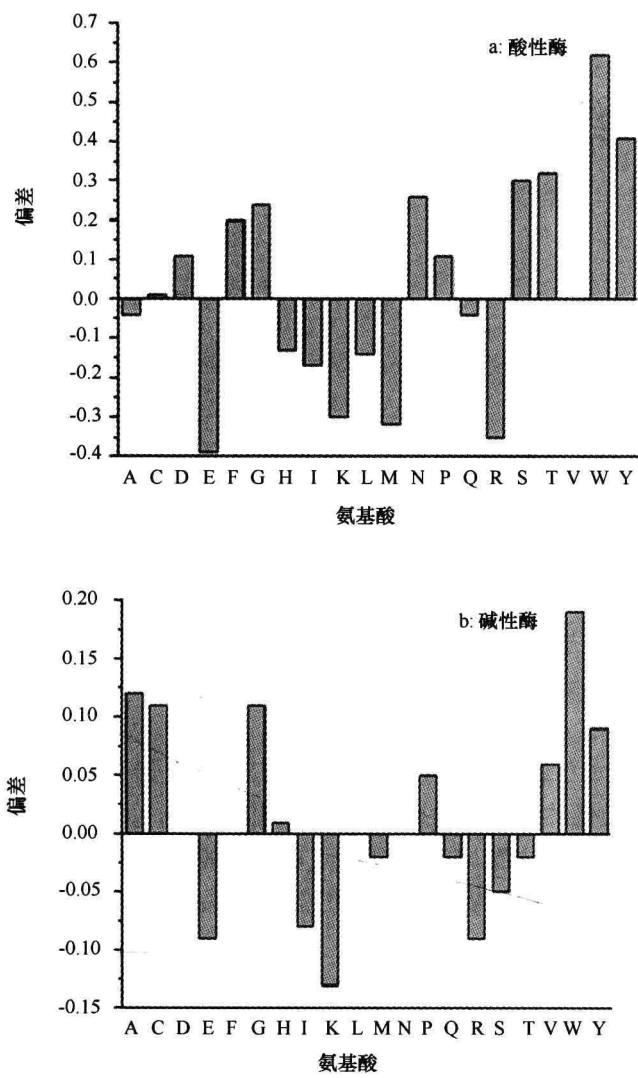


图 1 氨基酸组成的偏差

组氨酸激酶的同源模型

1 背景

组氨酸激酶是一个自身具有激酶、磷酸转移酶和磷酸酶活性的多功能酶,是原核生物中此调节转导系统通路中的核心蛋白^[1]。组氨酸激酶 YycG 属于 Pho 亚家族,其最初是在枯草杆菌中被鉴定的^[2]。该系统具有高保守性和低 G + C 含量的特点,不仅影响肺炎链球菌的存活,而且还参与了细菌毒力、感受态的形成以及维持菌体膜的完整性等^[3]。研究拟通过肺炎链球菌的组氨酸激酶 YycG 为研究对象进行同源模建,以期发现特异性的激酶抑制剂提供理论指导。

2 公式

经 Autodock4.0 分子对接后得到了 10 个对接构象,并根据 RMSD 值对这些构象进行聚类分析^[1]。选取能量最低的两个类的代表性构象,然后分析这两个构象和 YycG 活性腔内重要残基的相互作用情况。选择与重要残基相互作用较好的构象为最终的对接构象。底物 ADP 与肺炎链球菌组氨酸激酶 YycG 对接后由 Autodock4.0 计算得到的结合自由能为 -10.0 kcal/mol ^[4]。计算公式为:

$$\Delta G = (V_{\text{bound}}^{L-L} - V_{\text{unbound}}^{L-L}) + (V_{\text{bound}}^{P-P} - V_{\text{unbound}}^{P-P}) + (V_{\text{bound}}^{P-L} - V_{\text{unbound}}^{P-L} + \Delta S_{\text{conf}}) \quad (1)$$

式中, $L(\text{ligand})$ 指配体; $P(\text{Protein})$ 指受体, $P-L$ 指的是配体和受体蛋白复合物, V 是指成对的原子相互作用的评价。 bound 是指结合状态, unbound 是指未结合状态。结合自由能等于 4 个部分:配体结合前后的分子内能变化($V_{\text{bound}}^{L-L} - V_{\text{unbound}}^{L-L}$),受体蛋白结合前后的内能变化($V_{\text{bound}}^{P-P} - V_{\text{unbound}}^{P-P}$),配体和受体结合前后的分子间能量变化($V_{\text{bound}}^{P-L} - V_{\text{unbound}}^{P-L}$),以及结合以后构象熵的减少(ΔS_{conf}) (这一项由可旋转键数目决定)。

$$V = W_{\text{vdw}} \sum_{ij} \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}} \right) + W_{\text{hbound}} \sum_{ij} E(t) \left(\frac{C_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{D_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right) + W_{\text{elec}} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{\epsilon(r_{ij}) r_{ij}} + W_{\text{sol}} \sum_{ij} (S_i V_j + S_j V_i) e^{(-r_{ij}^2/2\sigma^2)} \quad (2)$$

式中, W_{vdw} 、 W_{hbound} 、 W_{elec} 、 W_{sol} 分别是指小分子配体与蛋白受体范德华相互作用、氢键相互作用

用、静电相互作用和去溶剂化作用权重系数, r 指原子对距离。第 1 项中 A, B 是取自 Amber 力场的范德华排斥和吸引参数。第 2 项中 C 是指 O-H 和 N-H 在 1.9 时 5 kcal/mol 的最大势井深; D 指 S-H 在 2.5 时 1 kcal/mol 的势井深; $E(t)$ 指出氢键相互作用与角度 t 有关。第 3 项中 q 是原子电荷。第 4 项中 S 是原子溶剂化参数, V 是原子体积, 距离权重因子 σ 为 3.5。

肺炎链球菌组氨酸激酶 YycG 蛋白活性位点处残基与底物 ADP 的相互作用如图 1 所示。

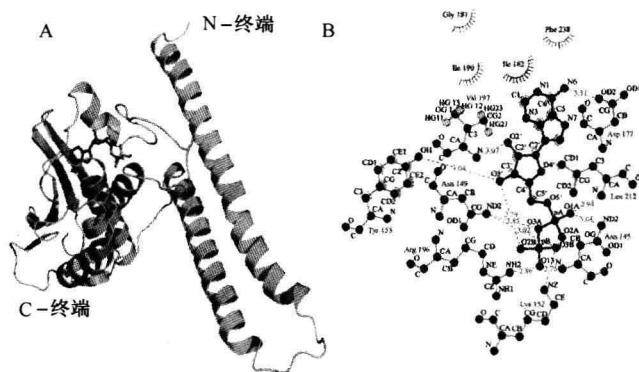


图 1 底物 ADP 与肺炎链球菌组氨酸激酶 YycG HATPase_c 功能域复合物结构(A)和用 ligplot 程序画出的 ADP 与口袋残基相互作用的结构图(B)

3 意义

采用同源建模的方法构建 YycG 蛋白的三维结构, 对肺炎链球菌双组分系统中的组氨酸激酶 YycG 进行同源建模, 并分析其与底物 ADP 的相互作用, 为寻找特异性的激酶抑制剂提供了理论依据。得到的同源建模结果对于虚拟筛选抗菌抑制剂具有一定的指导意义。

参考文献

- [1] 李南, 王非, 胥文春, 等. 肺炎链球菌双组分系统中的组氨酸激酶 (YycG) 的同源建模与分析. 生物工程学报, 2009, 25(2): 207 - 214.
- [2] Fabret C, Hoch JA. A two-component signal transduction system essential for growth subtilis: implications for anti-infective therapy. J Bacteriol, 1998, 180(23): 6375 - 6383.
- [3] Mohedano M L, Overweg K, Fuente ADL, et al. Evidence that the essential response regulator YycF in Streptococcus pneumoniae modulates expression of fatty acid biosynthesis genes and alters membrane composition. J Bacteriol, 2005, 187(7): 2357 - 2367.
- [4] Huey R, Morris G M, Olson AJ, et al. A semiempirical free energy force field with charge-based desolvation. J Comb Chem, 2006, 28(6): 1145 - 1152.