



农药降解规律模拟的一个回归函数模型

张大克, 王玉杰

(天津科技大学理学院, 天津 300457)

摘要: 在农药使用过程中,农药降解规律的模拟是一个重要环节,是食品安全的重要保证. 根据长期从事该方向研究的积累,给出了一个对农药降解规律进行模拟的回归函数模型,并提供了参数估计方法,以解决对农药降解规律进行模拟时回归函数模型确定的困难. 应用实例分析表明,所给回归函数模型适于对农药降解规律的模拟.

关键词: 农药降解规律; 模拟; 回归分析; 回归函数模型; 参数估计

中图分类号: O212.1 文献标志码: A 文章编号: 1672-6510(2010)06-0075-04

A Model of Regression Function for the Use of Simulating Pesticide Degradation Law

ZHANG Da-ke, WANG Yu-jie

(College of Science, Tianjin University of Science & Technology, Tianjin 300457, China)

Abstract: In the course of the employment of pesticide, the simulation of pesticide degradation law is important link, and it is important pledge of food safety. According to the accumulation to be engaged in this direction study for a long time, a model of regression function for the use of simulating pesticide degradation law was given, and the method of parameter estimation was provided, the difficulty to determine the regression function model for the use of simulating pesticide degradation law was solved. Application example showed the regression function model suit to simulating pesticide degradation law.

Keywords: pesticide degradation law; simulation; regression analysis; regression function model; parameter estimation

农药降解规律是指在农业生产中施用农药后,农药在谷物、蔬菜、果品、畜产品、水产品及土壤、水体中的残留量随时间变化的规律. 对这一规律的模拟是农药生产和使用中必不可少的重要环节,它直接关系到某种农药是否可以生产和销售,在什么时间使用,使用浓度是多少,使用多少时间后其残留量才能达到国家的农业行业标准要求. 这是有关食品安全的大事,有关人的生命和健康的大事,有关人类生存环境的大事. 对农药降解规律作出可靠的模拟和预测,科学地进行农药生产和使用,是避免农药中毒事件发生的重要保证,是食品安全的重要保证.

目前,国内外关于农药降解规律研究的方法大致可分为两类:一类是根据观测数据的散点图或折线图

进行描述,该方法的主要缺点是观测数据有限,描述的深刻程度和预测的可靠性不够^[1-3]. 另一类是运用数学的方法对农药降解的规律进行模拟,建立数学模型,并用数学模型来阐述农药降解的内在规律^[4-11]. 这类方法比较科学、可靠,是目前的主要方法.

运用数学的方法对农药降解规律进行模拟主要是选择合适的回归函数模型,运用回归分析的方法进行参数估计,得到预测模型^[4-9]. 当然也有一些研究者运用灰色系统理论、免疫进化算法、系统动力学原理等其他方法对农药降解规律进行模拟^[7-11],但这些方法都不是研究的主流.

本文将根据长期从事该方向研究的积累,给出一个对农药降解规律进行模拟的回归函数模型,并提供

收稿日期: 2010-01-12; 修回日期: 2010-02-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60776810)

作者简介: 张大克(1961—),男,吉林人,教授, zhdake@tust.edu.cn.

相应的参数估计方法,以解决对农药降解规律进行模拟时回归函数模型确定的困难. 所给出的回归函数模型相对目前国内外普遍使用的回归函数模型来说,适用范围大,变化灵敏,许多现在使用的模型都是它的特例.

1 回归函数模型

设 t 为使用农药后的时间, Y 为 t 时刻农药的残留量,运用回归分析的方法对农药降解规律进行模拟的回归函数模型记为

$$E(Y|t) = f(t) \tag{1}$$

则回归模型为

$$Y = f(t) + \varepsilon \tag{2}$$

其中 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$, 且回归函数 $f(t)$ 中的未知参数和 σ^2 都不依赖于 t .

设在 t_1, t_2, \dots, t_n 等不同时刻对农药残留量进行独立观测,对应的观测结果记为 (t_i, Y_i) , 观测值记为 $(t_i, y_i), i = 1, 2, \dots, n$. 则

$$Y_i = f(t_i) + \varepsilon_i, \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i = 1, 2, \dots, n \tag{3}$$

其中 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ 相互独立. 同时有

$$y_i = f(t_i) + \varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n \tag{4}$$

虽然不同品种的农药,在不同的条件下,使用于不同的对象,其降解规律各不相同,但它们的回归函数模型(1)有着一个共同的性质.

性质 对于回归函数模型(1),当 $t \geq 0$ 时, $f(t)$ 是一个单调减函数,且 $f(t) \geq 0$.

依据回归函数模型(1)应具有的性质和长期从事该方向研究的积累,对现有回归函数模型的不断改进和完善,建立了一个对农药降解规律进行模拟的回归函数模型:

$$f(t) = a[(t+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t+c)^k + d_2]} \quad (t \geq 0) \tag{5}$$

式中: $a, b, c, d_1, d_2, r, s, k$ 为未知参数,且 $a > 0, b \geq 0, c \geq 0, d_1 \geq 0, d_2 \geq 0, r \geq 0, s \geq 0, k \geq 0$. 显然当 $t \geq 0$ 时, $f(t) \geq 0$.

因为

$$\frac{df(t)}{dt} = -a(t+c)^{-1} [(t+c)^r + d_1]^{-s} \{sr[(t+c)^r + d_1]^{-1} (t+c)^r + bk(t+c)^{k-1}\} e^{-b[(t+c)^k + d_2]}$$

由模型(5)对未知参数 $a, b, c, d_1, d_2, r, s, k$ 的要求知,当 $t \geq 0$ 时, $\frac{df(t)}{dt} \leq 0$. 这说明当 $t \geq 0$ 时,模型(5)是单调减函数.

又因为

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} f(t) = \lim_{t \rightarrow +\infty} a[(t+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t+c)^k + d_2]} = 0$$

所以当 $t \geq 0$ 时, t 轴为其渐近线.

模型(5)具有的性质说明其适合作为对农药降解规律进行模拟的回归函数模型. 模型(5)的典型曲线图见图1.

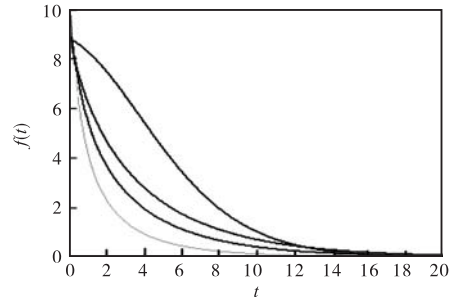


图1 模型(5)的典型曲线图

Fig.1 Typical curves figure of model(5)

当模型(5)中的参数 $s = 0, k = 1, c = 0, d_2 = 0$ 时,模型(5)转化为

$$f(t) = ae^{-bt} \quad (t \geq 0) \tag{6}$$

模型(6)即为对农药降解规律进行模拟的一级动力学方程模型,见文献[4-5, 7-10].

当模型(5)中的参数 $c = 0, r = 1, d_1 = 0, k = 2, d_2 = 0$ 时,模型(5)转化为

$$f(t) = at^{-s} e^{-bt^2} \quad (t \geq 0) \tag{7}$$

模型(7)即为对农药降解规律进行模拟的 Rayleigh 模型,见文献[6-7].

当模型(5)中的参数 $c = 0, s = 1, b = 0$ 时,模型(5)转化为

$$f(t) = \frac{a}{d_1 + t^r} \quad (t \geq 0) \tag{8}$$

模型(8)即为对农药降解规律进行模拟的阻滞动力学模型,见文献[9].

除了上述情况外,还有一些现用于对农药降解规律进行模拟的回归函数模型也是模型(5)的特例,如:

$$f(t) = a(t + d_1)^{-s} \quad (t \geq 0)$$

其中未知参数 $a > 0, s > 0, d_1 > 0$.

$$f(t) = a(t + d_1)^{-s} e^{-b(t + d_2)} \quad (t \geq 0)$$

其中未知参数 $a > 0, b > 0, s > 0, d_1 > 0, d_2 > 0$.

$$f(t) = a[(t+c)^2 + d_1]^{-s} \quad (t \geq 0)$$

其中未知参数 $a > 0, s > 0, d_1 > 0, c \geq 0$.

由上述讨论可知,在对农药降解规律进行模拟时,回归函数模型(5)的适用范围大,变化灵敏,许多现在使用的模型都是它的特例.

2 参数估计

由模型 (2) 和 (5) 得对农药降解规律进行模拟的回归模型

$$Y = a[(t+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t+c)^k + d_2]} + \varepsilon \quad (9)$$

其中 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$, 且 $a, b, c, d_1, d_2, r, s, k$ 和 σ^2 都不依赖于 t .

由模型 (3) 和 (5) 得

$$Y_i = a[(t_i+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t_i+c)^k + d_2]} + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i=1, 2, \dots, n$$

其中 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ 相互独立.

由模型 (4) 和 (5) 得

$$y_i = a[(t_i+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t_i+c)^k + d_2]} + \varepsilon_i, i=1, 2, \dots, n$$

由非线性最小二乘估计理论^[12]知, 模型 (9) 中未知参数 $a, b, c, d_1, d_2, r, s, k$ 的最小二乘估计值应为残差平方和

$$SSE = \sum_{i=1}^n \{y_i - a[(t_i+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t_i+c)^k + d_2]}\}^2 \quad (10)$$

的最小值点, 即优化模型

$$\min SSE = \sum_{i=1}^n \{y_i - a[(t_i+c)^r + d_1]^{-s} e^{-b[(t_i+c)^k + d_2]}\}^2$$

$$s.t. a > 0, b \geq 0, c \geq 0, d_1 \geq 0, d_2 \geq 0, r \geq 0, s \geq 0, k \geq 0.$$

$$(11)$$

的最优解. 记优化模型 (11) 的最优解为

$$(a^*, b^*, c^*, d_1^*, d_2^*, r^*, s^*, k^*)$$

则模型 (9) 中未知参数的最小二乘估计值为

$$\hat{a} = a^*, \hat{b} = b^*, \hat{c} = c^*, \hat{d}_1 = d_1^*$$

$$\hat{d}_2 = d_2^*, \hat{r} = r^*, \hat{s} = s^*, \hat{k} = k^*$$

所求对农药降解规律进行模拟的预测模型为

$$\hat{y} = \hat{a}[(t+\hat{c})^{\hat{r}} + \hat{d}_1]^{-\hat{s}} e^{-\hat{b}[(t+\hat{c})^{\hat{k}} + \hat{d}_2]}$$

优化模型 (11) 的最优解可用 Matlab 软件和 Lingo 软件进行计算, 预测模型的拟合效果 (拟合优度) 可以通过残差平方和 SSE 的大小以及判定系数 R 的大小来描述. 残差平方和 SSE 越小, 拟合效果越好. 判定系数 R 的计算公式为

$$R = \frac{TSS - SSE}{TSS}$$

式中: TSS 称为总变差平方和, $TSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$, 其中

$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$. 判定系数 R 的值越接近于 1, 拟合效果越好.

3 应用实例

对农药氰戊菊酯在甘蓝上的降解规律进行数学模拟, 建立预测模型. 用药后分 8 次观测了氰戊菊酯在甘蓝上的残留量, 用 t 表示用药后时间 (d), 用 y 表示 t 时刻残留量 (mg/kg), 观测结果见表 1.

表 1 观测结果

Tab.1 Observational results

用药后时间 t_i /d	12	15	18	23	28	36	46	56
残留量 y_i /(mg·kg ⁻¹)	1.084 8	0.738 2	0.433 9	0.245 1	0.224 5	0.100 3	0.064 5	0.039 3

根据散点图, 用回归模型 (9) 对氰戊菊酯在甘蓝上的降解规律进行数学模拟.

把观测结果代入优化模型 (11), 用 Matlab 软件进行优化计算, 得到模型 (9) 中未知参数的最小二乘估计值为

$$\hat{a} = 597.6, \hat{b} = 0.176 5, \hat{c} = 0.027 1$$

$$\hat{d}_1 = 2.047 0, \hat{d}_2 = 0.748 3, \hat{r} = 1.066 0$$

$$\hat{s} = 2.106 0, \hat{k} = 0.216 3$$

所求对氰戊菊酯在甘蓝上降解规律进行模拟的预测模型为

$$\hat{y} = 597.6[(t+0.027 1)^{1.066 0} + 2.047 0]^{-2.106 0} e^{-0.176 5[(t+0.027 1)^{0.216 3} + 0.748 3]} \quad (12)$$

模拟结果的残差平方和 $SSE = 0.006 672$, 判定系

数 $R = 0.993 1$, 这说明预测模型 (12) 的拟合效果很好. 模型 (12) 的曲线见图 2, 图 2 中的散点为观测值点.

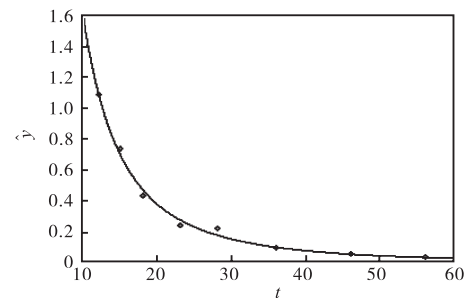


图 2 模型(12)的曲线图

Fig.2 Curvilinear figure of model(12)

由图2可见, 预测模型 (12) 的拟合效果的确很好.

参考文献:

- [1] 林金科,李秀峰,林小端,等. 4种农药在适制乌龙茶品种茶树上的自然降解动态[J]. 中国农学通报,2008,24(1):104-111.
- [2] 王冬群,韩敏晖,陆宏. 5种常用农药在露地青菜中的降解动态[J]. 江苏农业科技,2008(4):275-277.
- [3] 赵慧星,赵科华,车军,等. 实验室条件下几种常见农药降解规律研究[J]. 安徽农业科学,2009,37(6):2694-2695.
- [4] 冯明祥,陈振德,袁玉伟,等. 几种农药在露地黄瓜上的残留降解动态检测研究[J]. 农药科学与管理,2007,28(5):17-20.
- [5] 陈余平,付晓陆,邵圆圆,等. 农药在大棚与露地蔬菜中

降解动态研究[J]. 浙江农业科学,2007(6):694-696.

- [6] 朱成莲. 农药残留降解模型的参数估计[J]. 安徽农业科学,2008,36(17):7053-7056.
- [7] 闫亚杰. 农药残留降解动态数学模型的研究进展[J]. 甘肃农业科技,2005(7):57-59.
- [8] 宋萍,洪伟,吴承祯,等. 农药降解动力学模型的改进研究[J]. 中国生态农业学报,2005,13(2):68-70.
- [9] 赵红杰,叶非. 农药降解与残留分析中数学模型的应用[J]. 东北农业大学学报,2007,38(1):68-72.
- [10] 杨怀金,叶芝祥,徐成华,等. 基于 IEA 优化的农药降解 GM(1.1) 预测模型[J]. 农业环境科学学报,2007,26(4):1469-1472.
- [11] 王新洲. 非线性模型参数估计理论与应用[M]. 武汉:武汉大学出版社,2002:51-81.

(上接第61页)

由可达树可知,每个变迁都有发生权,并且所有的库所都是可达的,说明所建模型是具有活性的.

在主供应链系统中,由于整个系统中只一个库所内含有标识,所以系统是有界的,不会产生死锁现象.

同样方法可以得出子系统也是可达的、安全的.

4 结 语

本文应用 Petri 网技术,抽象出各层次模块中的库所、变迁等变量,并整理各变量之间的关系,来对复杂的供应链系统作分层分析,使所建模型更加直观地反映供应链的动态运行,逻辑性更强. 由于供应链系统是一个复杂的系统,要协调好供应链成员之间的关系,就要重点把握实物流、资金流、信息流等要素的合理分配与传递. 采用自顶向下,逐层分解的方法,将复杂的供应链系统逐级分解,有利于理清供应链中个结点之间的关系,并且在实物流的基础上,重点加强了信息流的收集与反馈,并加入了人为监督机制,使所建模型更加合理.

此外,本文没有对资金流做过多阐述,以后将在此方面对模型进行改进,为供应链系统的进一步优化

提供条件.

参考文献:

- [1] 黄小原. 供应链运作:协调、优化与控制[M]. 北京:科学出版社,2007:4-54.
- [2] 袁崇义. Petri 网原理与应用[M]. 北京:电子工业出版社,2005:18-22.
- [3] Murat T. Petri nets:properties,analysis and applications [C]// Proceedings of the IEEE. Piscataway:IEEE,1989,77(4):235-363.
- [4] Claude Girault,Rudiger Valk. 系统工程 Petri 网:建模验证与应用指南[M]. 王生原,余鹏,霍金健,译. 北京:电子工业出版社,2005:132-143.
- [5] 鲁晓春. 物流系统着色 Petri 网模型研究[D]. 北京:北京交通大学管理科学与工程学院,2008:32-50.
- [6] Busi N. Analysis issues in Petri nets with inhibitor arcs[J]. Theoretical Computer Science,2002,275(1/2):127-177.
- [7] 唐达,刘丹妮. 基于层次时间 Petri 网的工作流模型可达性分析方法[J]. 计算机集成制造系统,2006,12(4):487-493.