

DOI: 10.7524/AJE.1673-5897.20140610001

冯承莲, 付卫强, Dyer Scott, 等. 种间关系预测(ICE)模型在水质基准研究中的应用[J]. 生态毒理学报, 2015, 10(1): 81-87

Feng C L, Fu W Q, Scott D, et al. Application of interspecies correlation estimation (ICE) models in the study of water quality criteria [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2015, 10(1): 81-87 (in Chinese)

## 种间关系预测(ICE)模型在水质基准研究中的应用

冯承莲<sup>1</sup>, 付卫强<sup>2</sup>, Dyer Scott<sup>3</sup>, 樊明<sup>3</sup>, 吴丰昌<sup>1,\*</sup>

1. 中国环境科学研究院环境基准与风险评估国家重点实验室 北京 100012

2. 北京铁路电气化学校 北京 102202

3. 宝洁公司 美国俄亥俄州 45040

收稿日期: 2014-06-10 录用日期: 2014-08-14

**摘要:** 水质基准研究主要是基于物种的实验室测试的毒性数据开展的。对于一些毒性数据相对缺乏的化学品, 水质基准研究就会受到一定的影响。本文从水质基准研究方法的角度, 阐述了种间关系预测(ICE)的基本原理和基本方法, 系统介绍了ICE模型的毒性预测方法在水质基准研究中的应用, 并通过锌的ICE案例研究证明了模型在中国的可利用性。同时, 对ICE模型的不确定性和适用性进行了分析。最后, 对ICE模型存在的问题和未来的发展方向进行了探索和展望。

**关键词:** 锌; 水生生物; 种间关系预测(ICE); 水质基准; 物种敏感度分布; 毒性预测

文章编号: 1673-5897(2015)1-081-07 中图分类号: X171.5 文献标识码: A

## Application of Interspecies Correlation Estimation (ICE) Models in the Study of Water Quality Criteria

Feng Chenglian<sup>1</sup>, Fu Weiqiang<sup>2</sup>, Dyer Scott<sup>3</sup>, Fan Ming<sup>3</sup>, Wu Fengchang<sup>1,\*</sup>

1. State Key Laboratory of Environmental Criteria and Risk Assessment, Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012, China

2. Beijing Railway Electrification College, Beijing 102202, China

3. The Procter & Gamble Company, Ohio 45040, United States

**Received** 10 June 2014 **accepted** 14 August 2014

**Abstract:** Water quality criteria study is mainly based on the experimental toxicity data of species. For the chemicals that have few or incomplete toxicity data, the water quality criteria study will be negatively affected. This paper introduced rationale and methodology of interspecies correlation estimation (ICE) models from the angle of the water quality criteria methods. And their application in deriving water quality criteria was comprehensively analyzed. The case study of zinc proved the applicability of ICE in deriving water quality criteria for China. In addition, the uncertainty and the applicability of the ICE model were analyzed. Finally, the development of ICE models and their potential use for assessing water quality were also explored in future.

**Keywords:** zinc; aquatic life; interspecies correlation estimation (ICE); water quality criteria; species sensitivity

基金项目: 环保公益性行业科研专项(201409037); 环保公益性行业科研专项(201309060)

作者简介: 冯承莲(1981-), 女, 博士, 副研究员, 研究方向为水生态毒理和水质基准, E-mail: fengcl@craes.org.cn;

\* 通讯作者(Corresponding author), E-mail: wufengchang@vip.skleg.cn

distributions (SSD); toxicity prediction

污染物生物毒性数据的缺乏是水质基准研究和生态风险评价中的常见问题,尤其对于一些新型污染物,毒性数据的相对缺乏更加制约了水质基准的研究进程。因此,如何在数据缺乏的情况下开展水质基准方面相关研究,是一个极具挑战的问题,此时,模型预测的方法就显得尤为重要。比较传统的模型预测方法是定量结构活性相关(quantitative structure activity relationship, QSAR)模型, QSAR 作为化合物风险评价中预测生物毒性基础数据的一种经济、有效的方法,已经得到了广泛应用<sup>[1-2]</sup>。但是 QSAR 的方法也有它的局限性,在预测污染物对高等生物毒性方面,还存在很多不确定性。种间关系预测(interspecies correlation estimation, ICE)模型是一种基于物种之间毒性的相关关系而构建的一种预测方法,种间关系预测可以用简单低等生物毒性试验来代替高等生物毒性测试,用简单毒性测试体系代替复杂的毒性测试体系。ICE 模型最初是由美国环保局(US EPA)开发出来的一种用已知物种的毒性数据来预测未知物种毒性的软件方法<sup>[3-4]</sup>。后来, ICE 模型经过不断开发和升级,开始推出了一种网络在线预测平台,并且内置了水生生物和野生生物等的预测模块<sup>[5]</sup>。随着 ICE 模型的不断扩展,目前在线预测的操作平台(<http://www.epa.gov/ceampubl/fchain/webice/>),可以预测水生生物(藻类、鱼类、无脊椎动物)和陆地野生生物(主要是鸟类、哺乳类等)生物的毒性,并且针对稀有生物和濒危物种,也有很好的预测效果<sup>[6]</sup>。ICE 预测方法能够弥补由数据不足造成的物种敏感度分布(species sensitivity distribution, SSD)曲线拟合不准确的缺点,能够提供未知物种的预测毒性数据。目前, ICE 主要针对急性毒性数据展开,针对慢性毒性数据的预测方法还没有建立,主要是因为慢性数据相对较少,不确定性因素较大,目前还没有正式推广。

利用 ICE 方法进行水质基准研究有以下几个优点:1) 能够利用有限的毒性数据对未知数据进行预测;2) 减少了动物的实验使用量;3) 充分的数据构建 SSD,使拟合更优化。关于 ICE 模型的预测准确性,已经有相关的研究。Dyer 等<sup>[7-8]</sup>运用 ICE 模型对重金属和有机物水生生物急性毒性的预测适用性进行了验证,获得了很好的线性相关关系。同时,将 ICE 预测得出的 SSD 和实际测定的数据构建的 SSD 进行了比较分析,结果无显著性差异。基于

ICE 得出的水质基准值与实际测定的毒性数据得出的水质基准值差距在一个数量级内。运用 ICE 模型既可以进行水生生物的毒性预测,也可以进行野生生物的预测,一些学者开展了 ICE 测相关预测研究,结果证明 ICE 模型用于预测物种的毒性是可行的<sup>[9-13]</sup>。

如何将 ICE 运用到水质基准的研究中,这是水质基准研究一个重要挑战。本研究从 ICE 的理论方法学入手,系统介绍了 ICE 的预测原理、预测方法。并以锌为案例,分析了模型预测在水质基准研究中的应用,并对模型的适用性和不确定性进行了分析。研究结果可以丰富水质基准的理论方法学,为水质基准和风险评估提供理论支持。

## 1 ICE 的基本理论和方法

### 1.1 ICE 的基本原理

ICE 模型是用化学品已知的实验测定的毒性数据(LC<sub>50</sub>/LD<sub>50</sub>)来预测化学品对未知物种、属或科的急性毒性的一种方法。其中选定的用来预测其他物种毒性数据的物种,我们称为“替代物种”(surrogate species),而被预测的物种,我们称为“预测物种”(predicted species)。在 ICE 模型中,替代物种的毒性值和预测物种的毒性值存在最小二乘法线性回归的关系。ICE 的数据集,最初是综合集成了各种毒性数据库、标准毒性测试方法、物种测试手册等建立的<sup>[14-17]</sup>,内置了 4 082 个模型,其中包括 143 种水生和陆生的物种<sup>[3]</sup>。后来,模型不断优化和升级,并且 ICE 软件预测逐渐被在线预测方式所代替(Web-ICE)。目前的在线预测平台中,包含了 5 000 多个急性毒性值,其中涵盖了接近 200 个物种、1 000 多种化学品的毒性数据。而且模型目前仍在不断升级中。最新的在线预测平台中,增加了藻类的预测数据,使模型预测的数据范围不断扩大<sup>[6]</sup>。在所有包含的毒性数据里面,水生动物毒性数据主要包括 48 h 或 96 h 的 EC<sub>50</sub>/LC<sub>50</sub>,毒性终点主要是致死或者运动抑制效应;藻类的毒性数据主要是 72 h 或 96 h 的 EC<sub>50</sub>;野生生物(主要是鸟类和哺乳类)的 96 h 的 LD<sub>50</sub>。同时,除了毒性终点有要求外,对数据集里的环境因子也有要求,如水体硬度、pH 值和温度等。通过统计分析和线性回归,最终基于替代物种的毒性数据和预测物种的毒性数据的线性关系,对预测物种的毒性数据进行预测。两者的线性关系如下:

$$\log X_2 = a + b \times \log X_1$$

其中,  $X_1$  是指替代物种的毒性数据;  $X_2$  为预测物种的毒性数据;  $a$  和  $b$  为拟合的线性参数。经过对数变换后, 替代物种和预测物种之间存在线性相关关系, 如图所示:

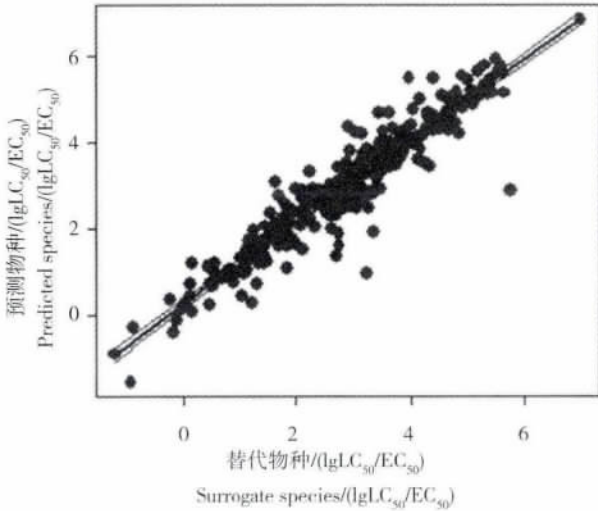


图 1 ICE(种间关系预测)概念模型示意图<sup>[18]</sup>

Fig. 1 Schematic diagram of ICE (interspecies correlation estimation)<sup>[18]</sup>

### 1.2 ICE 模型的评价准则

运用 ICE 模型进行毒性预测时,并不是所有预测出来的结果都是可用的,模型预测的准确性和精确性需要从统计学的角度进行衡量。要综合考虑一系列统计学参数,选择准确率最高的毒性作为预测数据,而对于一些相关性较差的预测数据,需要将其舍弃,最终确定预测数据的可用性。主要的统计学参数包括均方差(mean square error, MSE)、交叉验证率、置信区间、自由度、相关系数( $R^2$ )、显著性水平( $p$  值)等<sup>[6]</sup>。具体的筛选原则如下:1)  $MSE < 0.22$ ; 2) 替代物种和预测物种的分类学距离  $\leq 3$  (物种分类学距离:替代物种和预测物种如果是属于同一属,则两

者的分类学距离定为 1;如果是属于同一科,则两者的分类学距离为 2;如果属于同一目,则两者的分类学距离为 3,以此类推。); 3) 交叉验证率大于 85%; 4) 相对较窄的置信区间; 5) 相对较高的自由度 ( $df > 8, N > 10$ , 即构建模型的数据量必须大于 10, 自由度越高,预测越准确); 6) 相对较高的相关系数,即  $R^2 > 0.6$ ; 7) 相对较低的  $p$  值,一般要求  $p < 0.01$ 。只有在满足了以上的条件,ICE 模型预测出来的毒性数据才会有较高的准确率和精确率,从而最终用于水质基准的研究。当然最理想的一种预测通常是指替代物种和预测物种满足以上所有条件,这种情况下得出的预测值跟实测值最为接近。

### 2 ICE 模型的案例研究

我们之前已经根据中国的物种实测数据对锌的水生生物基准开展了研究<sup>[19]</sup>。为了探讨 ICE 模型适用性和预测准确性,我们以锌为例,对 ICE 的预测开展案例研究。ICE 模型预测根据以下步骤进行:1) 选择替代物种; 2) 采用在线预测平台 (Web-ICE) 对模型中其他存在的物种进行预测; 3) 对预测出的毒性数据按照统计学参数进行筛选; 4) 用预测数据进行水质基准研究,并与实测值进行比较。

首先根据所获得的实际物种的毒性数据分布,最终选取 3 个数据量相对较多、又具有一定代表性的物种为替代物种进行模型的预测。这 3 个替代物种分别为:大型蚤 (*Daphnia magna*)、鲤鱼 (*Cyprinus carpio*) 和虹鳟 (*Oncorhynchus mykiss*)。根据这 3 个物种的急性毒性数据的几何均值,用美国环保局的在线 ICE 预测平台 (<http://www.epa.gov/ceampubl/fchain/webice/>) 对其他物种的毒性进行预测。最后将获得的所有预测毒性数据进行汇总。以虹鳟作为替代物种为例,部分预测物种的毒性值预测结果如表 1 所示:

表 1 以虹鳟为替代物种进行预测的 ICE 模型统计学参数

Table 1 Statistical parameters of ICE model by using rainbow trout as a surrogate species

预测物种 Predicted species	$R^2$	Mean square error (MSE)	p 值 p value	交叉验证率 Cross-validation success rate	物种距离 Taxonomic distance	自由度 Degree of freedom
三文鱼 ( <i>Salmo salar</i> )	0.954	0.031	<0.01	84.61	2	11
大马哈鱼 ( <i>Oncorhynchus kisutch</i> )	0.988	0.022	<0.01	100	1	15
绿色太阳鱼 ( <i>Lepomis cyanellus</i> )	0.913	0.031	<0.01	92.3	3	11
蓝鳃太阳鱼 ( <i>Lepomis macrochirus</i> )	0.889	0.216	<0.01	90.29	3	307

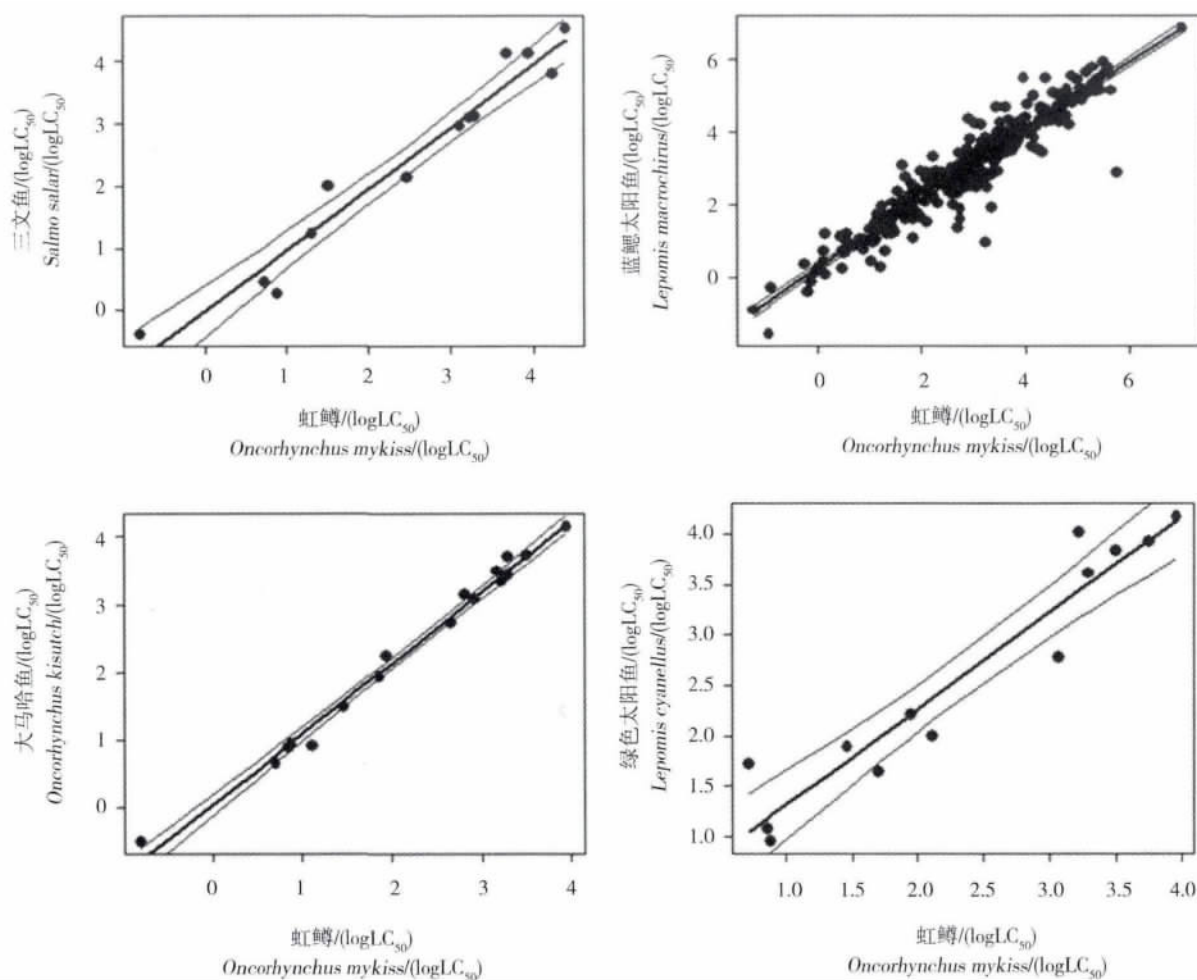


图2 基于ICE模型的替代物种和预测物种毒性数据相关关系

Fig. 2 Relationship of toxicity values between surrogate species and predicted species based on ICE

由此可见,用虹鳟(*Oncorhynchus mykiss*)作为替代物种预测的值都符合数据的筛选原则,预测结果较好。预测相关关系如图2所示。

与虹鳟类似,我们将另外2个替代物种大型蚤(*Daphnia magna*)和鲤鱼(*Cyprinus carpio*)的预测毒性值进行了筛选,最终将3个替代物种的所有预测值进行汇总,共获得了20个预测物种的毒性数据。通过与实测的毒性数据拟合的SSD比较发现,用ICE预测的SSD和实测数据的SSD没有显著性差异;通过与实测获得的 $HC_5$ 比较发现,预测的 $HC_5$ 约为实测 $HC_5$ 的2.2倍<sup>[20]</sup>,表明ICE这种预测方法从统计学上来讲是可以接受的。

锌的案例研究从侧面证明了ICE模型对物种的毒性进行预测的可行性,也就是说,这种ICE模型预测的水质基准推导方法用于中国污染物的水质基准研究是可信的。这也就解决了部分污染物的毒性数据不足导致水质基准无法准确推导的难题。

### 3 ICE模型的适用性分析

#### 3.1 ICE模型的不确定性分析

ICE模型预测存在很多不确定性因素,替代物种的选择,预测结果的取舍等都会影响最终预测结果的准确性。评价模型的不确定性要从两方面来考虑。首先,必需清楚ICE模型预测的特点。并不是每一个预测的数据都可以直接采用,要根据方法原理提到的统计学参数进行综合判断,只有符合筛选条件的数据才可以采用,否则会影响模型的准确性<sup>[6]</sup>。其次,输入模型的替代物种毒性数据必需符合条件。在模型的预测过程中,最关键的一个步骤是替代物种的选择。选择几个物种,以及选择哪几个物种作为替代物种,这是模型的关键。通常来讲,选择的替代物种至少要包括2~3种,涵盖不同的营养级;另外,替代物种要有一定的代表性,并且自身的毒性数据量相对丰富。如Dyer等<sup>[8]</sup>在用ICE进

行毒性预测时发现,只用鱼的毒性数据来预测其他鱼类,远比用鱼类的毒性数据预测所有的鱼类和其他无脊椎动物的预测相关性要好。所以在选择替代物种时,最终选用了大型蚤作为其中一个替代物种,来预测无脊椎动物的毒性;而选用虹鳟为替代物种,预测其他鱼类的毒性。ICE 模型预测的过程对输入的数据有一个范围限制,如果输入的数据超出了模型预测的范围,将得不到预测结果,或者预测结果不可用。因此要保证预测结果的准确性,输入的数据必须在模型要求的数据上下限范围内,这样才能保证预测数据的可用性,否则得出的预测结果将存在很大不确定性。而且,目前的 ICE 模型预测,还仅仅局限在预测物种的急性毒性,而对于慢性毒性的预测,还没有更好的预测方法。如果想要得到物种的慢性毒性数据,只能通过物种的急慢性毒性比进行外推,这样就更增加了模型的不确定性<sup>[18]</sup>。所以这也是 ICE 模型在应用上的一个局限性。

### 3.2 ICE 模型的适用性

ICE 模型最初是由 US EPA 相关研究人员开发的预测软件。随后他们又开发了在线预测平台,使模型的应用更加广泛。模型建立的基础是基于多个毒性数据库、文献资料、研究报告等的集合,主要针对的物种也是北美的主要物种,并没有涉及到亚洲以及其他地方的本土物种,因此在模型的应用中,应该考虑物种敏感度差异。目前的 ICE 模型预测,只是针对北美物种开展的,而其他地区的物种并没有纳入 ICE 的预测范围,这就使 ICE 在应用上存在很多局限性<sup>[21]</sup>;同时,物种的分布以及物种的种类也会有显著差异。在 ICE 模型中的普遍种和优势种,在其他地区可能不是广泛存在的。因此特定区域的毒性预测还存在很多不确定性,需要进行模型的验证和校正才能使用。

ICE 模型在中国锌的水质基准研究的成功应用,从侧面证明了 ICE 模型在中国是可用的。ICE 模型的可用性很大程度上与中美生物区系的相似性有关系。我们之前的研究也发现,中国和美国由于在气候带、纬度范围以及国土面积等方面存在很多相似点,因此物种分布以及物种敏感度也没有显著性差异<sup>[22-23]</sup>,这应该是 ICE 模型在中国可用的一个重要原因。也有其他一些学者在分析区域间的物种敏感度差异时,发现了相似的结果,即不同区域的物种敏感度的差异并不显著<sup>[24-26]</sup>。这就预示着 ICE 模型的应用范围有扩大的潜力。当然,ICE 模型在一个特定地区是否可用,还需要进行模型预测值的筛选,并与实测数据进行对比分析。

必要的时候,需要用本地物种进行实验验证和校正,进一步确定 ICE 模型是否可用。

## 4 展望

ICE 模型是近几年才逐渐建立的预测物种生物毒性的模型。与其他预测模型相比,比如 QSAR, ICE 模型的应用还不够广泛和成熟。随着科学学者对水质基准研究的不断深入,单靠动物实验的手段来获得物种毒性数据的方法已经不能满足人们研究的需要。尤其是针对稀有物种和濒危物种来说,通过实验获取其毒性数据的方法也是不现实的,因此模型预测的手段将会是一个很好的替代方法。利用模型预测也会逐渐成为水质基准研究重要手段。模型预测尽量避免毒性实验中大量实验动物的消耗,特别是当污染物的毒性数据相对较少时,用模型预测的方法对污染物的水质基准展开研究,是未来水质基准的发展趋势<sup>[21-27]</sup>。将 ICE 模型预测用于生态风险评估是一个开创性工作,将会增大风险评估的研究范围,为风险管理提供理论支持。ICE 提供了一种预测生物急性毒性的一种方法,分类单元包括种、属、科等。这种毒性预测能够为化学品的危害评估和生态风险评价提供支持。从 ICE 模型在生态风险评估用的应用来看,它贯穿了生态风险评价的问题提出环节和风险分析环节。比如在问题提出环节,ICE 的预测能够筛选具有潜在危害的污染物;而在风险分析环节,ICE 则能够预测大多数物种的毒性效应。因此,用 ICE 模型对特定物种进行毒性预测可以作为一种替代安全因子的方法。当然,结合其他已经存在的暴露和风险模型进行 ICE 预测,也可以进行生态风险评价<sup>[28]</sup>。ICE 模型除了预测单个物种的急性毒性之外,还可以直接用来构建 SSD 曲线,并获得化学品保护不同水平物种的危害浓度(如 HC<sub>1</sub>、HC<sub>5</sub>、HC<sub>10</sub>等),预测结果可以直接用于风险评估,并作为不确定性分析的重要组成部分。

ICE 模型应用的一个很大的局限性是由区域差异性导致的。就现存的 ICE 模型来看,它的预测范围和预测精度仅仅局限于北美物种,而对于非北美区域的毒性预测,其准确性和可信性还需要进一步验证。如何将 ICE 模型本地化,或者将其通用化,很重要的一个环节就是如何将特定区域的本地物种毒性数据以及相关参数嵌入到 ICE 模型中,并对其预测精度进行统计分析和验证。如何将 ICE 模型用于非北美物种的预测,将是一个值得考虑的问题。还需要科学家进行大量的预测验证以及模型验证。

其中,测试模型的稳定性、样本量的大小、物种之间生物学距离以及模型预测的置信区间等都需要进行评价。另外,目前ICE模型还只能预测物种的急性毒性值,并不能反映化学品对物种长期暴露的影响。对于一些雌激素类化合物,可能在低剂量长期暴露的条件下才会对物种产生不利影响,影响生物的繁殖、繁育等。所以对于这类污染物的慢性毒性预测,ICE模型还存在一定困难。这将是一个具有挑战性的工作,需要科学家不断的努力来进一步完善ICE模型。

就水质基准目前的研究方法来看,基于实验室毒性数据的传统研究方法仍是水质基准的主流方法,尤其是毒性数据的筛选和拟合模型显得尤为重要<sup>[29-30]</sup>。但是当面对一些毒性数据相对较少,或者无法通过实验获得的数据时,ICE模型的优势就会表现出来。当水质基准的研究需要大批量的实验数据并且需要高效的结果产出时,模型预测就显得尤为重要。当然,由于ICE模型自身的不确定性因素,将模型用于水质基准研究和生态风险评估的工作极富挑战性,也是目前水质基准研究的国际前沿和发展方向。

通讯作者简介:吴丰昌(1964—),男,研究员,博士生导师,环境基准与风险评估国家重点实验室主任,主要研究方向为环境基准与风险评估,天然有机质环境生物地球化学行为等。

#### 参考文献(References):

- [1] Gramatica P, Papa E. Screening and ranking of POPs for global half-life: QSAR approaches for prioritization based on molecular structure [J]. *Environmental Science & Technology*, 2007, 41(8): 2833–2839
- [2] Wu F C, Mu Y S, Chang H, et al. Predicting water quality criteria for protecting aquatic life from physico-chemical properties of metals or metalloids [J]. *Environmental Science & Technology*, 2013, 47: 446–453
- [3] Asfaw A, Ellersieck M R, Maye F L. Interspecies correlation estimations (ICE) for acute toxicity to aquatic organisms and wildlife. II. User Manual and Software [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, 2003
- [4] Ellersieck M, Asfaw A, Mayer F, et al. Acute-to-chronic estimation (ACE v 2.0) with time-concentration-effect models: User Manual and Software [R]. EPA 600-R-03-107. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, 2003
- [5] Raimondo S, Vivian D N, Barron M G. Web-based interspecies correlation estimation (Web-ICE) for acute toxicity: User Manual version 2.0 [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, National Health and Environmental Effects Research Laboratory, 2007
- [6] Raimondo S, Jackson C R, Barron M G. Web-based interspecies correlation estimation (Web-ICE) for acute toxicity: User Manual version 3.2 [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, National Health and Environmental Effects Research Laboratory, 2013
- [7] Dyer S D, Versteeg D J, Belanger S E, et al. Interspecies correlation estimates predict protective environmental concentrations [J]. *Environmental Science & Technology*, 2006, 40: 3102–3111
- [8] Dyer S D, Versteeg D J, Belanger S E, et al. Comparison of species sensitivity distributions derived from interspecies correlation models to distributions used to derive water quality criteria [J]. *Environmental Science & Technology*, 2008, 42: 3076–3083
- [9] Raimondo S, Jackson C R, Barron M G. Influence of taxonomic relatedness and chemical mode of action in acute interspecies estimation models for aquatic species [J]. *Environmental Science & Technology*, 2010, 44: 7711–7716
- [10] Barron M G, Jackson C R, Awkerman J A. Evaluation of in silico development of aquatic toxicity species sensitivity distributions [J]. *Aquatic Toxicology*, 2012, 116-117: 1–7
- [11] Raimondo S, Mineau P, Barron M. Estimation of chemical toxicity to wildlife species using interspecies correlation models [J]. *Environmental Science & Technology*, 2007, 41: 5888–5894
- [12] Awkerman J A, Raimondo S, Barron M G. Development of species sensitivity distributions for wildlife using interspecies toxicity correlation models [J]. *Environmental Science & Technology*, 2008, 42: 3447–3452
- [13] 王斌,余刚,黄俊,等.应用ICE和PCA方法评价硝基芳烃的综合毒性[J].*环境科学*,2007,28(8):1774–1778
- Wang B, Yu G, Huang J, et al. Evaluation of integrated toxicity of nitroaromatic compounds by the combination of ICE and PCA [J]. *Environmental Science*, 2007, 28(8): 1774–1778 (in Chinese)
- [14] Mayer F L. Acute toxicity handbook of chemicals to estuarine organisms [R]. Gulf Breeze, FL: U. S. Environmental Protection Agency, 1987: 274
- [15] Mayer F L, Ellersieck M R. 1986 manual of acute toxic-

- ity: Interpretation and data base for 410 chemicals and 66 species of freshwater animals, resource publication 160 [R]. Washington DC: U. S. Fish and Wildlife Service, 1986
- [16] US EPA. ECOTOX. Release 2.0. Ecotoxicology Database [DB]. [www.epa.gov/ecotox](http://www.epa.gov/ecotox). 2002
- [17] Buckler D R, Mayer F L, Ellersieck M R, et al. Evaluation of minimum data requirements for acute toxicity value extrapolation [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, 2003
- [18] Dale H. The use of interspecies correlation estimation (ICE) in interpreting chemical risks to aquatic species [R]. Washington DC: Ecological Fate and Effects Division, Office of Pesticide Programs & Health and Ecological Criteria Division, Office of Water, 2011
- [19] 吴丰昌,冯承莲,曹宇静,等. 锌对淡水生物的毒性特征与水质基准的研究[J]. 生态毒理学报, 2011, 6(4): 367-382
- Wu F C, Feng C L, Cao Y J, et al. Toxicity characteristic of zinc to freshwater biota and its water quality criteria [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2011, 6(4): 367-382 (in Chinese)
- [20] Feng C L, Wu F C, Dyer S D, et al. Derivation of freshwater quality criteria for zinc using interspecies correlation estimation models to protect aquatic life in China [J]. Chemosphere, 2013, 90: 1177-1183
- [21] Feng C L, Wu F C, Mu Y S, et al. Interspecies correlation estimation-applications in water quality criteria and ecological risk assessment [J]. Environmental Science & Technology, 2013, 47(20): 11382-11383
- [22] Wu F C, Feng C L, Zhang R Q, et al. Derivation of water quality criteria for representative water-body pollutants in China [J]. Science China: Earth Sciences, 2012, 55(6): 900-906
- [23] Feng C L, Wu F C, Zhao X L, et al. Water quality criteria research and progress [J]. Science China: Earth Sciences, 2012, 55(6): 882-891
- [24] Kwok K, Leung K, Lui G, et al. Comparison of tropical and temperate freshwater animal species' acute sensitivities to chemicals: Implications for describing safe extrapolation factors [J]. Integrated Environmental Assessment and Management, 2007, 3(1): 49-67
- [25] Rico A, Waichman R G, Van den B. Effects of malathion and carbendazim on amazonian freshwater organisms: Comparison of tropical and temperate species sensitivity distributions [J]. Ecotoxicology, 2011, 20: 625-634
- [26] Wheeler J R, Leung K M, Morritt D, et al. Freshwater to saltwater toxicity extrapolation using species sensitivity distribution [J]. Environmental Toxicology and Chemistry, 2002, 21(11): 2459-2467
- [27] Feng C L, Wu F C, Zheng B H, et al. Biotic ligand models for metals—A practical application in the revision of water quality standards in China [J]. Environmental Science & Technology, 2012, 46: 10877-10878
- [28] US EPA. TRES: Terrestrial residue exposure model [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, Office of Pesticide Programs, 2005. [http://www.epa.gov/oppfed1/models/terrestrial/trex\\_users-guide.htm#content4](http://www.epa.gov/oppfed1/models/terrestrial/trex_users-guide.htm#content4)
- [29] Stephen C E, Donald I M, David J H, et al. Guidelines for Deriving Numerical National Water Quality Criteria for the Protection of Aquatic Organisms and Their Uses [R]. Washington DC: U. S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, 1985
- [30] 金小伟,王业耀,王子健. 淡水水生态基准方法学研究: 数据筛选与模型计算 [J]. 生态毒理学报, 2014, 9(1): 1-13
- Jin X W, Wang Y Y, Wang Z J. Methodologies for deriving aquatic life criteria (ALC): Data screening and model calculating [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2014, 9(1): 1-13 (in Chinese) ◆