中国科学: 生命科学 2026 年 第 56 卷 第 4 期: 1027 ~ 1037
SCIENTIA SINICA Vitae lifecn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS
论 文

基于贝叶斯融合马尔可夫链蒙特卡罗的概率方法评估丁氟螨酯膳食暴露风险

刘姝甜[1,2], 吴曼妮[2], 李贤宾[3], 张斌[1*], 程有普[1], 陈增龙[2*]

1. 天津农学院园艺园林学院, 天津 300384
2. 中国科学院动物研究所, 动物多样性保护与有害动物防控全国重点实验室, 北京 100101
3. 农业农村部农药检定所, 北京 100125
* 联系人, E-mail: chenzenglong@ioz.ac.cn; zhangbin370825@163.com

收稿日期: 2025-09-25; 接受日期: 2026-01-30; 网络版发表日期: 2026-04-13

摘要 针对传统基于@Risk与Crystal Ball的概率评估方法仅关注输入变量随机性, 却忽略模型核心参数(如残留量回归模型中α, β, σ)不确定性的问题, 本研究提出贝叶斯-马尔可夫链蒙特卡罗(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)与概率模拟相融合的方法, 用于量化丁氟螨酯(cyflumetofen, CYF)在草莓中的膳食风险. 通过JASP构建农药残留量的贝叶斯线性回归模型以获取参数后验分布, 在R语言中提取α, β, σ的MCMC链并生成包含参数与残差不确定性的后验预测浓度样本. 将该样本导入Crystal Ball后, 结合Gamma分布的人群草莓消费量与正态分布的人群体重数据, 计算暴露量及风险商(hazard quotient, HQ). 经10万次蒙特卡罗模拟, 输出风险商分布的P95值, 进而与传统方法开展对比验证. 结果显示传统基于@Risk与Crystal Ball的概率评估方法因未考虑模型参数不确定性, 存在丁氟螨酯膳食风险高估情形. 本研究提出的融合方法可有效量化参数不确定性的影响, 为丁氟螨酯在草莓生产中的安全监管提供更精准、科学的风险评估依据.

关键词 贝叶斯, MCMC, 概率模拟, 残留风险, 膳食暴露

农药残留引发的膳食风险评估是保障公众健康的关键环节, 直接关系到食品安全性与公共卫生防控体系的有效性. 近年来, 随着消费者对生鲜农产品品质关注度的提升, 草莓等浆果类水果中的农药残留问题逐渐成为研究热点. 据研究表明, 长期摄入含微量农药残留的食物可能增加慢性疾病风险, 尤其对儿童、孕妇等敏感人群构成潜在威胁[1~6]. 当前, 膳食风险评估方法已从早期的点估计法逐步发展为基于@Risk, Crystal Ball等工具的概率法[7~10], 通过模拟风险商分布提升评估的科学性, 但仍存在显著技术局限.

常规概率评估法的核心缺陷在于将回归参数视为固定值, 忽略其统计不确定性. 在农药残留预测模型中, 回归参数本身源于样本数据估计, 必然存在抽样误差与模型不确定性. 这种简化处理会导致风险商分布的尾部概率被系统性高估, 可能过度放大极端暴露场景下的健康风险. 例如, 在草莓等农产品的残留预测中, 固定参数假设会正确放大不同种植区域、气候条件对残留量的影响差异, 使高残留概率区间的估算

引用格式: 刘姝甜, 吴曼妮, 李贤宾, 等. 基于贝叶斯融合马尔可夫链蒙特卡罗的概率方法评估丁氟螨酯膳食暴露风险. 中国科学: 生命科学, 2026, 56: 1027–1037
Liu S T, Wu M N, Li X B, et al. Probabilistic assessment of cyflumetofen dietary exposure risks by a Bayesian framework with Markov Chain Monte Carlo (in Chinese). Sci Sin Vitae, 2026, 56: 1027–1037, doi: 10.1360/SSV-2025-0323

© 2026《中国科学》杂志社 www.scichina.com
https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

结果偏离实际且更趋保守. 相比之下, 贝叶斯框架的核心优势是可融合先验知识与观测数据, 通过后验分布较为系统地量化参数不确定性, 避免传统方法“固定参数”导致的偏差; 而马尔可夫链蒙特卡罗(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)算法作为高效抽样工具, 能突破复杂后验分布的计算瓶颈, 实现大规模迭代模拟. 二者结合不仅能区分“参数不确定性”与“个体暴露变异性”, 还能输出风险商的完整概率分布, 清晰呈现极端场景与常态场景的风险差异, 针对这一痛点, 本研究提出融合贝叶斯框架与概率模拟的创新技术路径: 通过贝叶斯模型推导残留预测参数的后验分布, 量化其统计不确定性; 结合MCMC高效抽样算法, 将参数不确定性传递至蒙特卡罗模拟过程, 最终实现变异性(个体暴露差异)与不确定性(参数估计误差)的耦合分析. 该方法的突破点在于在农药残留膳食风险评估领域内尝试实现残留预测模型参数的后验分布传递, 一定程度上填补传统概率模拟在参数不确定性处理上的空白.

本研究以草莓中丁氟螨酯残留为研究对象, 旨在构建一个融合贝叶斯统计框架、MCMC抽样与蒙特卡罗模拟的评估模型. 在此框架下, MCMC作为核心抽样技术, 通过处理贝叶斯后验分布来实现参数不确定性的量化, 最终精准评估膳食风险商(hazard quotient, HQ)的概率分布特征. 该模型通过与传统概率方法(@Risk/Crystal Ball), 及MCMC单一方法(基于平台RStudio)的对比, 验证其在极端风险捕捉、评估精度提升等方面的优越性, 为农药残留膳食风险评估提供方法学参考.

1 材料与方法

1.1 材料、试剂与仪器

供试材料为中国8个草莓主产区(北京市、吉林省、辽宁省、河北省、河南省、安徽省、湖北省及广西壮族自治区)的代表性草莓果实, 样品选取标准为果皮完整、无病斑且质地良好. 本研究依据OECD《化学品测试指南》第509号[11], 在上述产区的大棚内开展试验, 试验小区面积50 m^2、设3次重复及对照区(近三年未施用丁氟螨酯类药剂); 于草莓二斑叶螨始发期、首次采收前3天, 以180 g a.i./hm^2有效成分叶面喷施农药(施用间隔3天). 采样避开小区边缘, 优先选取无病斑、质地良好的果实: 消解动态研究于施药后0天(2 h)、1/3/5/7天采样, 最终残留及果酱用样品于末次施药后3天采集; 每个小区取2份独立样品及空白样品, 经冷链运输至实验室, –20℃储存并于24 h内完成前处理.

试验试剂包括: 丁氟螨酯(CYF)标准品(纯度≥98%)、代谢物B-1标准品(纯度≥98%)、2-三氟甲基苯甲酸(B-1)标准品(纯度≥98%, 作为内标); 乙腈(色谱纯, 购自北京赛默飞世尔科技有限公司, 中国), 用于样品提取及标准溶液配制; 草莓空白基质提取液(经确认不含目标物及干扰物), 用于基质匹配校准曲线的绘制.

主要仪器设备有高效液相色谱-串联质谱仪(HPLC-MS/MS, 中国安捷伦科技有限公司, 中国), 用于目标物的定性与定量分析; 涡旋混匀器(杭州奥盛仪器有限公司, 中国), 用于样品与标准溶液的混匀处理; 高速离心机(Thermos Fisher Scientific, 美国), 用于样品提取液的离心净化; 以及可调式移液器(10~1000 μL (Eppendorf, 德国)、50 mL聚丙烯离心管等前处理耗材.

1.2 方法学确证

为保障CYF及代谢物B-1残留检测的科学性, 本研究开展方法学确证, 并明确数据统计与暴露评估的分析手段, 具体如下, 对空白草莓基质提取液的分析表明, 在CYF(保留时间2.12 min)及其代谢物B-1(保留时间1.35 min)的保留时间处, 未出现明显的干扰峰. 该结果证实方法对目标物检测具有良好的特异性, 基质效应处于可控水平, 为检测数据的准确性提供支持. 以乙腈溶剂、草莓基质提取液配制0.01~1.0 mg/L的CYF及B-1标准溶液系列, 经仪器检测并做线性回归分析, 表明浓度与峰面积线性关联稳定. 且回收率70%~120%、RSD<20%, 满足定量需求. 综上, 本方法符合SANTE/11312/2021验证标准[12], 灵敏度较前人研究高10~500倍, 分析时间缩短43%~80%, 可高效精准检测草莓中CYF残留[13~16].

1.3 模型构建

1.3.1 贝叶斯线性回归模型搭建

贝叶斯统计推断框架是以贝叶斯定理为核心, 通过将先验概率与观测数据结合来推导后验概率, 从而

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

实现参数估计与不确定性量化; 该框架支持在模型构建中融入先验知识, 有效处理复杂的数据关联[17~19]. JASP是一款开源的统计分析软件, 支持贝叶斯统计等多种分析方法, 界面友好, 便于开展数据导入、模型搭建等操作[20]. 为精准量化丁氟螨酯在草莓中的膳食风险, 构建融合模型时, 先利用JASP软件搭建贝叶斯线性回归模型[21]. 在开展丁氟螨酯在草莓中膳食风险评估的模型构建工作时, 基于草莓丁氟螨酯残留实验数据推进这一关键环节整理实验数据, 涵盖不同施药场景后检测的丁氟螨酯残留量Y, 以及施药浓度、施药间隔、采摘时间等影响残留的可观测变量X, 将其规整为CSV, Excel等结构化表格格式. 随后, 在JASP软件中通过“数据导入”功能加载对应文件, 完成Y(因变量, 代表草莓中丁氟螨酯残留量)与X(自变量, 涵盖各类影响残留的因素)的变量映射. 基于这些数据, 利用JASP构建农药残留量的贝叶斯线性回归模型$Y=\alpha+\beta X+\varepsilon$, $\varepsilon\sim N(0,\sigma^2)$, 其中$\alpha$为截距项, β是自变量对应的系数, ε为服从均值为0、方差为σ^2正态分布的残差, 用于描述模型无法解释的随机误差部分[22].

1.3.2　MCMC链处理与预测样本生成

R语言(RStudio)是广泛应用于统计分析、数据处理与可视化的编程工具, 具备丰富的数据操作函数和统计分析包, 为数据分析流程提供灵活高效的实现环境; MCMC是通过构建马尔可夫链抽取样本, 实现复杂后验分布近似推断的算法, 能有效处理贝叶斯模型中参数的不确定性量化问题. 在完成JASP中贝叶斯线性回归模型的构建并获取参数后验分布后, 需借助R语言对MCMC链进行深度处理, 以生成包含参数与残差不确定性的后验预测浓度样本[23,24]. 首先, 从JASP中导出贝叶斯线性回归后验分析数据, 通过R语言的read.csv函数将其导入并存储为数据框格式(后续转换为可分析对象). 为验证链的可靠性, 利用coda包开展收敛性诊断: 调用gelman.diag(samples)函数执行Gelman-Rubin诊断[25,26], 计算潜在缩放因子(当结果接近1且满足R-hat<1.05时, 表明链收敛良好); 通过plot(samples, trace=TRUE)绘制迹图(轨迹图), 直观检查链间是否重叠、波动是否平稳, 确保MCMC链数据的质量.

基于贝叶斯线性回归模型的预测逻辑, 处理残差不确定性时, 可参考EFSA“通过计算纳入额外不确定性”的思路: 将残差不确定性视为需纳入的额外不确定性来源, 通过在被评估量尺度上, 把残差不确定性的影响判断为加法或乘法因子(以分布或概率界表示), 再通过计算与前期量化的参数不确定性结合, 类似用额外评估因子应对不确定性的成熟做法[27]. 具体操作中, 使用sample函数从α, β的MCMC链中随机抽取多组参数样本(抽样次数可根据模拟精度需求设定, 如10000次)[27], 这些样本充分反映模型参数的后验不确定性, 避免传统固定参数点估计忽略参数变异性的局限. 同时, 结合σ的MCMC链结果确定残差服从的正态分布$\varepsilon\sim N(0,\sigma^2)$参数, 利用R语言的rnorm函数为每组抽样参数模拟对应的残差ε, 并将参数抽样值与模拟残差代入模型, 计算得到后验预测浓度样本, 此过程同步纳入参数与残差的双重不确定性, 使预测浓度样本能全面反映丁氟螨酯在草莓中残留的潜在波动. 契合EFSA对不确定性量化需综合考量多来源影响的理念[28].

最后, 通过write.csv(as.matrix(samples),“mcmc_results.csv”)将MCMC链数据(或整理后的预测样本)保存为结构化文件, 便于后续追溯与复用; 再通过描述性统计函数(如summary)和可视化代码(如ggplot2包绘图)初步分析样本分布特征, 随后将生成的预测样本导出, 作为输入数据导入Crystal Ball软件, 为后续膳食暴露量与风险商的概率模拟奠定基础, 实现从残留浓度不确定性分析到膳食风险量化的有效衔接.

1.3.3　MCRA概率模拟融合

在完成R语言中后验预测浓度样本的生成后, 借助Crystal Ball进行概率模拟融合以量化最终膳食风险的具体过程如下, 首先将从MCMC链中提取的α, β, σ的大量数值导入Crystal Ball, 通过软件对这些参数数据进行拟合分析, 直接输出α, β, σ在各个百分位点的数值, 以此精准捕捉参数在不同概率水平下的取值特征. 随后, 根据人群体重数据与草莓膳食消费量数据, 基于风险评估的核心公式构建计算逻辑: 先利用“Exp=(浓度×消费量)/体重”计算暴露量(其中浓度值由Crystal Ball拟合得到的α, β, σ百分位点值代入贝叶斯线性回归模型推导得出), 再依据“HQ=Exp/ADI”(ADI为丁氟螨酯的日允许摄入量)计算最终风险商. 通过将各百分位点的参数值与体重、消费量数据逐一结合, 系统完成Exp与HQ的计算, 最终得到风险商的分布结果及P95值. 本方法通过Crystal Ball拟合参数百分位点、结

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

合实际暴露数据计算风险的思路，能更真实反映丁氟螨酯在草莓中的膳食风险水平. 具体流程详见图1.

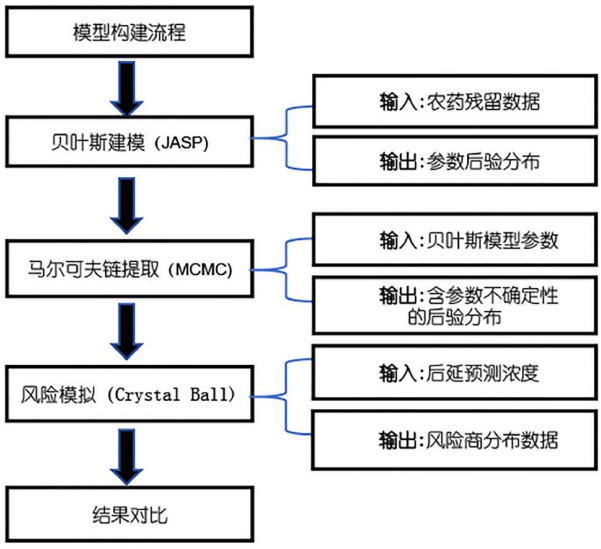


图 1 考虑参数不确定性的膳食风险评估流程

Figure 1 Dietary risk assessment process considering parameter uncertainty

2 结果与分析

2.1 贝叶斯模型参数后验分布特征

在贝叶斯模型参数后验分布特征分析中，基于JASP构建丁氟螨酯在草莓中残留量的贝叶斯线性回归模型，借助表1呈现的参数后验分布核心统计特征，结合模型可视化结果，可深度挖掘数据蕴含信息. 从模型参数层面看，截距项(intercept)作为无自变量干预时草莓中丁氟螨酯的基础残留基线，其后验均值为0.203，95%可信区间(0.16，0.248)与标准差0.02，定量刻画草莓品种异质性、环境本底差异等复杂因素对基础残留的扰动效应，表明基础残留水平并非传统模型假设的固定值, 而是受现实条件约束的概率分布.

图2A直观呈现截距项与时间(天)系数后验分布的摘要统计量, 截距项的点估计及区间宽度, 清晰展现这种概率分布特征；图2B进一步以可视化形式呈现截距项的概率分布形态，分布峰值对应后验均值0.203，曲线分布范围与95%可信区间(0.16，0.248)契合，直观印证基础残留的不确定性. 时间(天)系数后验均值为−0.004，表明丁氟螨酯残留量随时间推移呈现出微弱的衰减趋势. 然而，该趋势的估计存在较大的不确定性: 其95%可信区间为(−0.036, 0.017)覆盖了0值. 这一结果表明, 数据存在较大不确定性, 无法排除时间效应无影响或为正(即略有增加)的可能性. 可信区间向正值方向延伸，提示在极端气候事件干扰农药降解、草莓生理状态发生突变等特殊情境下，时间对农药残留量存在产生反向影响的风险；后验标准差0.011则进一步量化该时间效应估计的波动性. 图2C显示，残差随机分布在零点附近，无明显的异方差性或非线性趋势. 图2D验证了模型残差的正态性假设，图中的点大致贴合理论分位数直线，说明残差基本符合正态分布特征. 为进一步从整体上评估模型的拟合优度，本研究进行后验预测检验(posterior predictive check，PPC). 该检验通过比较原始观测数据与模型生成的预测分布来评估模型再现数据的能力. 如图2E所示，绝大多数观测数据点都落在模型95%后验预测区间(灰色区域)内，且与预测均值的趋势高度一致. 这表明模型能够很好地捕捉数据的核心特征与变异性，整体拟合良好，因此, 保障了模型假设的合理性.

基于JASP的贝叶斯线性回归结果显示，其参数后验分布特征及可视化结果突破传统确定性模型的局限，精准捕获农残系统的复杂性. 这与“通常贝叶斯分析中后验分布方差会收敛至0，最终形成单点分布”的理想状态不同——农残系统受样本基质干扰、检测技术误差、田间时空变异等固有因素制约，这种不确定性如同物种分化时间估计中的化石误差，即便纳入足量数据, 也始终无法完全消除[29]. 因此, 为有效抵消这

表 1 贝叶斯线性回归模型参数后验分布特征

Table 1 Posterior distribution characteristics of parameters in the bayesian linear regression model: focus on 95% CIs

效应项	包含后验概率	排除后验概率	数据支持纳入的后验概率	数据支持排除的后验概率	纳入贝叶斯因子	后验均值	后验标准差	95%可信区间	
系数	*P*(incl)	*P*(excl)	*P*(incl|data)	*P*(excl|data)	BF inclusion	Mean	SD	Lower	Upper
截距	1	0	1	0	1	0.203	0.02	0.16	0.248
时间(d)	0.5	0.5	0.346	0.654	0.529	−0.004	0.011	−0.036	0.017

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

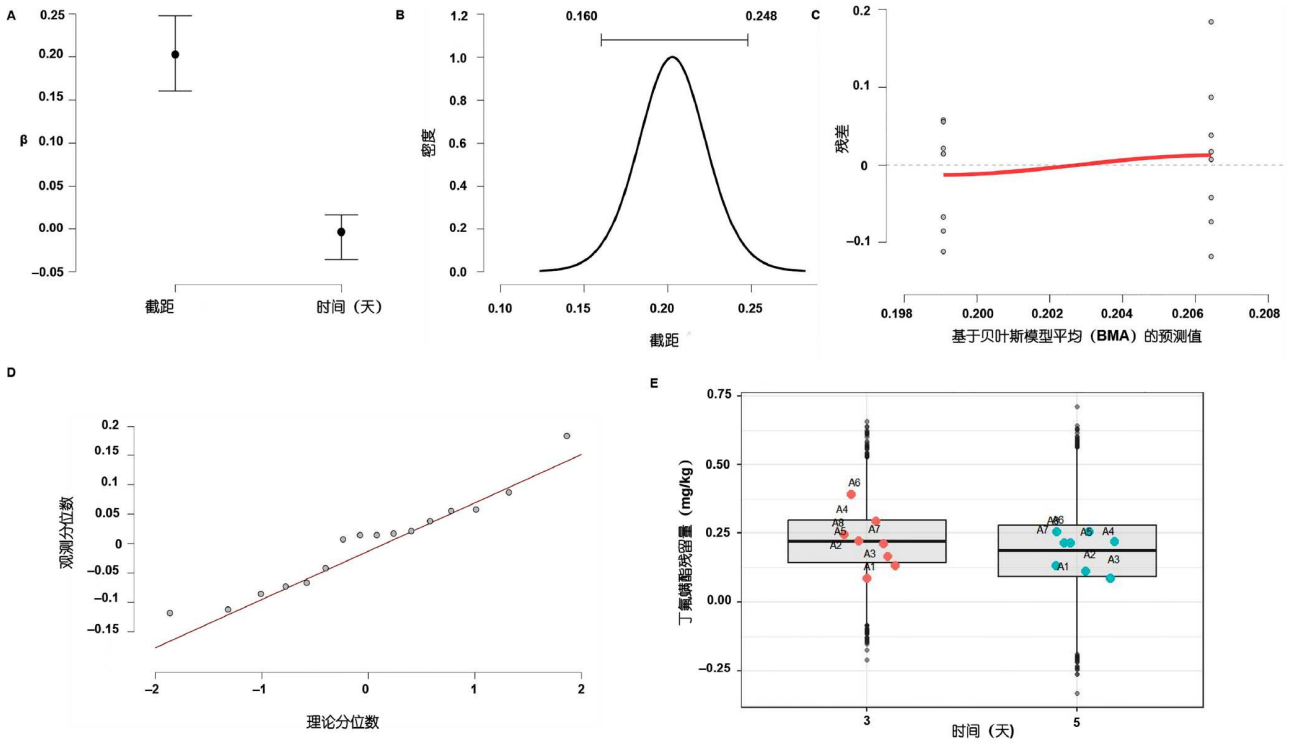


图 2　贝叶斯线性回归模型拟合结果. A: 贝叶斯线性回归参数后验估计森林图; B: 截距项边际后验分布密度图; C: 标准化残差与拟合值的关系图; D: 贝叶斯线性回归的Q-Q图(分位数-分位数图); E: 后验预测检验

Figure 2　Fitting results of Bayesian linear regression model. A: Forest plot of posterior estimates for Bayesian linear regression parameters; B: marginal posterior distribution density plot of the intercept term; C: plot of standardized residuals *vs*. fitted values; D: Q-Q plot (quantile-quantile plot) of Bayesian linear regression; E: posterior predictive check

一客观存在的不确定性，后续研究进一步运用MCMC算法展开深入分析.

2.2　MCMC后验预测浓度分布

依托贝叶斯线性回归模型参数后验分布(表1)，在RStudio环境中执行MCMC模拟，实现“参数不确定性与残差不确定性”的双重融合传递. 本次模拟生成了包含截距项α、时间系数β、残差σ的MCMC链结果数据，每个参数链均有30001条数据, 为深度挖掘不确定性提供充足样本支撑，基于模型形式逐次抽取链中参数样本并叠加残差扰动，生成覆盖“均值-波动-极端情境”的后验预测浓度样本集. 该样本集突破传统“固定参数点估计”的局限，通过MCMC链的遍历性，完整保留模型参数不确定性(如截距项概率分布、时间系数的波动风险)对残留浓度的影响. 例如，截距项后验分布的异质性扰动、

时间系数可信区间覆盖0所反映的统计不确定性，均通过MCMC模拟传递至浓度预测，使输出的预测浓度不仅反映后验均值所提示的“最可能随时间衰减”的趋势，更量化极端气候、草莓生理突变等特殊情境下的残留异常风险.

通过图3A轨迹图(trace plot)、密度图(density plot)及图3B自相关图(autocorrelation plot)可直观验证MCMC模拟的有效性与参数后验分布特征[30]：迹图中，α, β, σ对应的曲线在迭代过程中围绕稳定均值波动，无明显漂移或周期性变化，结合30001条数据构建的充足样本基础，表明MCMC链具备良好遍历性，已充分探索参数后验分布空间，确保后续预测浓度能覆盖复杂不确定性、密度图呈现出α单峰对称、β尾部向0延伸、σ量化残差波动范围的分布形态, 与表1参数特征及研究场景相契合，清晰刻画参数后验分布概率形态；自相关图里，自相关系数随滞后阶数增加快速趋近于0，在30001条大样本量下，样本间仍保持良好独立性，说明MCMC链样本间无显著序列相关性，保证参数抽样的有效真实性, 同时也反映模型的不确定性.

上述可视化分析，不仅验证MCMC模拟的收敛性

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

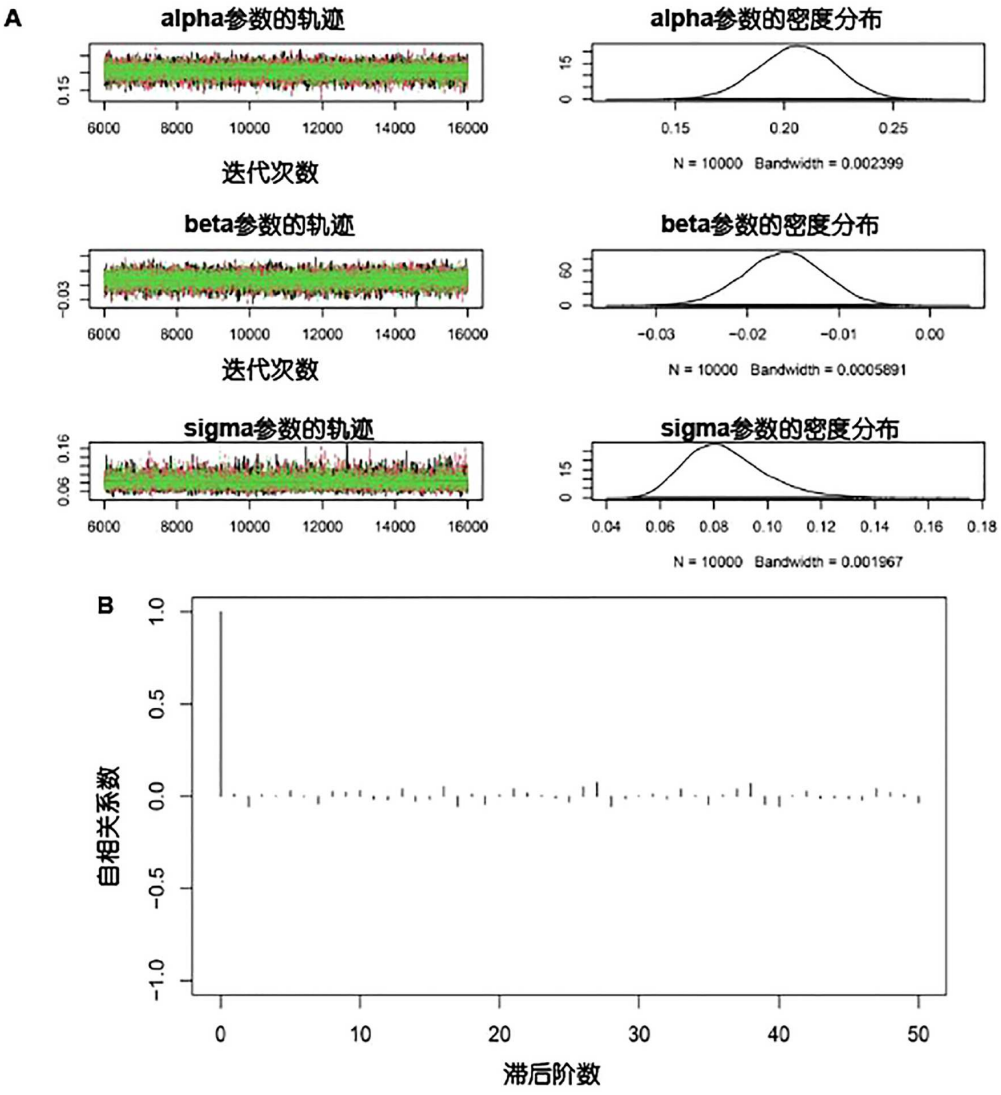


图 3 MCMC模拟收敛性验证结果. A: MCMC模拟收敛性验证: 迹图与后验密度分布; B: MCMC模拟的自相关验证图
Figure 3 Validation results of MCMC simulation convergence. A: Validation of MCMC simulation convergence: trace plots and posterior density distributions; B: autocorrelation validation plot of MCMC simulation

与可靠性，更从“链稳定性-分布形态-样本独立性”维度，阐释参数不确定性向浓度预测传递的内在逻辑. 30001条数据支撑的轨迹图保障链的遍历性，确保预测覆盖复杂不确定性；密度图则直观呈现出参数概率分布，支撑不确定性传递的理解；自相关图规避样本自相关偏差, 保障数据质量. 三者共同筑牢基础, 为后续将预测浓度导入Crystal Ball开展膳食风险评估，提供“数据可靠、不确定性传递清晰”的支撑，使“残留-暴露-风险”全链条分析更具统计学严谨性与现实解释力(表2).

2.3 膳食风险评估结果

依托MCMC模拟得到含参数与残差不确定性的后验预测浓度, 将其导入Crystal Ball, 与消费量(Gamma分布)、体重(正态分布)数据耦合，严格遵循暴露量及风险商公式，针对不同人群特征(如年龄分层、消费习惯差异等)开展10万次蒙特卡罗模拟，输出膳食风险商分布特征. 经模拟计算，借助MCMC&Crystal Ball融合方法得到多场景下HQ分布的关键分位数区间，具体为50th(0.125%~0.878%)、75th(0.135%~0.945%)、95th(0.149%~1.044%)、97.5th(0.153%

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

表 2 不同概率模拟方法的膳食风险商分位数对比
Table 2 Comparison of dietary HQ percentiles among different probabilistic simulation methods

模型/百分位数	50th	75th	95th	97.5th	99.9th
@risk	0.086%~0.605%	0.117%~0.819%	0.177%~1.240%	0.201%~1.411%	0.344%~2.418%
Crystal ball	0.092%~0.644%	0.125%~0.875%	0.191%~1.200%	0.129%~1.279%	0.242%~1.698%
MCMC&Crystal ball	0.125%~0.878%	0.135%~0.945%	0.149%~1.044%	0.153%~1.077%	0.170%~1.192%
MCMC	1.500%	2.250%	2.850%	2.925%	2.997%

~1.077%)、99.9th(0.170%~1.192%). 从分位数特征看, 部分场景中随着分位数提升(如95%分位数), HQ呈上升趋势, 清晰反映极端暴露情境下的风险放大效应. 本研究风险可控的判定严格遵循国际法典委员会(CAC)、欧洲食品安全局(EFSA)风险评估准则及我国《食品安全国家标准食品中农药最大残留限量》(GB2763-2026)(https://down.foodmate.net/standard/sort/3/173410.html). 以丁氟螨酯日允许摄入量(ADI=10%)为基准, 核心判断标准为HQ的95%分位数(P95)≤1, 本研究各场景P95上限仅0.01044, 远低于该阈值, 初步表明丁氟螨酯在草莓中的膳食风险处于可控范围, 而不同场景下HQ分布的差异, 有效捕获现实中草莓品种异质性、环境本底差异导致的残留波动, 以及人群消费行为、体重差异等复杂条件带来的风险异质性.

2.4 方法学对比

为解析不同概率模拟方法在丁氟螨酯膳食风险评估中的表现差异, 选取@risk, Crystal ball传统方法, 以及本研究MCMC&Crystal ball融合方法和MCMC方法, 围绕50th, 75th, 95th, 97.5th, 99.9th关键分位数展开对比. 从数据看, @risk的HQ分布区间50th为0.086%~0.605%, 95th达0.177%~1.240%; Crystal ball 50th区间0.092%~0.644%, 95th为0.191%~1.200%; 融合方法各分位数区间(50th: 0.125%~0.878%、95th: 0.149%~1.044%等)呈现独特规律; MCMC方法各分位数则为固定值, 50th是1.500%, 75th为2.250%, 95th达2.850%, 97.5th为2.925%, 99.9th是2.997%. 进一步对比@risk与Crystal ball传统方法的差异可知: 在中低分位数(50th, 75th), Crystal ball的HQ区间(50th: 0.092%~0.644%; 75th: 0.125%~0.875%)整体宽于@risk(50th: 0.086%~0.605%; 75th: 0.117%~0.819%), 反映出Crystal ball对残留波动的“基础分布假设”相对宽松, 允许风险区间有更大跨度; 而@risk因算法框架对数据波动的“隐性约束”, 区间更紧凑, 一定程度简化了常态暴露的复杂性. 在高分位数(95th, 97.5th, 99.9th), @risk的风险区间(95th: 0.177%~1.240%; 99.9th: 0.344%~2.418%)显著宽于Crystal ball(95th: 0.191%~1.200%; 99.9th: 0.242%~1.698%). 这源于@risk对“残留-暴露链条”波动的简化假设不足, 在极端分位场景下, 未充分约束模型参数的不确定性传递, 导致风险区间因过度纳入“假设波动”而膨胀; Crystal ball虽通过基础分布设置部分刻画波动, 但因缺乏参数后验的动态更新, 极端分位风险被相对“压缩”, 却也因简化参数不确定性, 难以精准匹配真实暴露的极端场景. 而MCMC方法, 其各分位数均为固定值且数值较高, 与其他方法的区间形式截然不同. 这是因为MCMC在模拟过程中, 若未充分结合实际残留暴露的复杂波动情况, 仅基于自身的模拟逻辑, 会导致对风险的估计呈现出这种固定且偏高的结果, 不能很好地反映真实暴露下风险的波动范围, 在膳食风险评估的实际应用中, 较难精准匹配真实的暴露场景.

简言之, @risk依赖算法框架的“被动波动纳入”, 易在极端场景因假设粗放高估风险; Crystal ball依赖基础分布的“主动波动设置”, 但因参数动态性不足, 在常态与极端分位均存在偏差; MCMC因对实际残留暴露波动考量不足, 模拟结果固定且偏高, 难以精准匹配真实场景. 三者的差异本质是算法黑箱波动、分布假设波动与单一模拟逻辑的方法学局限, 也凸显本研究融合MCMC挖掘参数后验分布的必要性. 传统方法因仅依赖固定参数或简化概率假设, 对模型参数不确定性刻画不足: @risk基于特定算法框架, 未充分纳入残留-暴露链条的复杂波动, 在极端分位数(如99.9th)易因简化假设高估风险(区间达0.344%~2.418%); Crystal ball虽可设置基础分布, 但对参数后验的动态不确定性传递有限, 导致部分分位数(如

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

97.5th)风险区间(0.129%~1.279%)与实际暴露存在偏差; MCMC则因缺乏对实际残留暴露波动的有效结合, 结果固定且偏离真实风险情况. 融合方法通过MCMC链深度挖掘参数后验分布, 将“参数不确定性与残差波动”双重维度纳入模拟[31]: 在中低分位数(如50th, 75th), 因精准还原草莓残留受品种、环境的常态波动, 风险区间(如50th, 0.125%~0.878%)略高于传统方法, 体现出了对真实残留暴露基线的更优拟合; 在高分位数(如95th, 99.9th), 又因参数不确定性的约束, 避免传统方法因“过度简化波动”产生的极端高估, 使区间(如99.9th 0.170%~1.192%)窄于@risk, Crystal ball, 也与MCMC方法固定且偏高的结果形成鲜明对比. 最终输出的风险分布, 既不遗漏常态波动的风险基线, 又能精准约束极端场景的无依据放大, 结合显著性分析(P<0.05)结果, 充分证明本方法为农药膳食风险评估提供更贴合现实暴露逻辑的方法学路径.

3 讨论

3.1 结果解读

本研究构建融合贝叶斯MCMC与概率模拟的方法, 借助MCMC模拟获取含参数与残差不确定性的后验预测浓度, 经Crystal Ball耦合消费量、体重分布开展膳食风险评估. 从结果看, 不同分位数下膳食风险商分布呈现清晰特征, 中低分位数区间反映草莓残留受品种、环境等常态波动影响的真实风险基线, 高分位数区间因贝叶斯框架对参数不确定性的约束, 避免极端风险不合理放大, 完整呈现“残留-暴露”复杂系统的风险传递逻辑, 印证该方法可精准量化丁氟螨酯在草莓中的膳食风险, 为理解农药残留风险形成机制提供实证支撑.

3.2 与传统方法的对比

对比@risk, Crystal Ball传统概率模拟方法, 融合方法展现出显著差异. 传统方法因简化模型参数不确定性, 或依赖固定参数假设(@risk), 或对残留波动传递不足(Crystal Ball), 导致风险区间与实际暴露存在偏差, 极端分位数易出现不合理高估或低估. 而融合方法通过MCMC深度挖掘参数后验分布, 将残留浓度的参数波动与残差扰动纳入模拟, 中低分位数贴合常态残留暴露基线, 高分位数收敛极端场景风险, 有效弥补传统方法的缺陷, 证明其在捕捉复杂系统不确定性上的方法学优势, 为膳食风险评估提供更贴近现实的路径.

3.3 研究局限性

尽管融合方法优势显著, 但仍存在局限. 一方面, 研究聚焦丁氟螨酯在草莓中的残留, 作物品种单一性可能限制方法普适性, 不同农药-作物组合的残留动力学差异, 需进一步验证方法有效性; 另一方面, 模拟中消费量、体重分布基于通用统计特征, 未充分考虑特定人群(如职业暴露者、特殊饮食习惯群体)的异质性, 可能导致风险评估与实际暴露存在偏差. 后续需拓展作物类型、细化人群暴露参数, 提升方法普适性与精准度.

3.4 实践意义

从实践角度, 本方法为农药残留膳食风险评估提供新的方法学思路. 相较于传统方法, 其更精准的风险量化能力, 可辅助监管部门识别丁氟螨酯等农药的关键风险场景(如极端残留暴露的高风险人群), 优化农药使用阈值与监管策略; 同时, “参数不确定性传递”的风险评估逻辑, 可为其他农药-食品组合的风险评估提供参考框架, 推动食品安全风险管理从“经验判断”向“精准概率评估”转变, 助力提升食品安全保障水平.

4 结论

本研究构建融合贝叶斯MCMC与概率模拟的方法, 突破传统方法忽略模型参数不确定性的局限, 实现残留预测模型参数后验分布的传递, 能更全面量化草莓中丁氟螨酯的膳食风险. 与传统方法相比, 融合方法可有效避免风险商分布尾部的不合理低估或高估, 精准捕捉极端风险, 证明其在复杂系统风险评估中的优越性. 研究成果不仅为丁氟螨酯的膳食风险管控提供科学依据, 也为农药残留膳食风险评估的方法学创新奠定基础, 对完善食品安全风险管理体系、提升风险监管精准度具有实践指导意义, 有望推动农药残留风险评估向更精准、更贴合现实的方向发展, 为提升食品安全风险管理水平提供参考.

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

参考文献

1 Rowe C, Gunier R, Bradman A, et al. Residential proximity to organophosphate and carbamate pesticide use during pregnancy, poverty during childhood, and cognitive functioning in 10-year-old children. Environ Res, 2016, 150: 128–137

2 Lu C, Schenck F J, Pearson M A, et al. Assessing children's dietary pesticide exposure: direct measurement of pesticide residues in 24-Hr duplicate food samples. Environ Health Perspect, 2010, 118: 1625–1630

3 Elser B A, Hing B, Stevens H E. A narrative review of converging evidence addressing developmental toxicity of pyrethroid insecticides. Crit Rev Toxicol, 2022, 52: 371–388

4 Sun Y Y, Jin Y T, Wu B, et al. Study on genotoxicity of aldicarb and methomyl (in Chinese). Envtl Sci, 2010, 31: 2973–2980 [孙肖瑜, 金永堂, 吴斌, 等. 涕灭威、灭多威的遗传毒性研究. 环境科学, 2010, 31: 2973–2980]

5 Zhang R. Effects of fungicide propamocarb on embryonic development and lipid metabolism in zebrafish (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Hangzhou: Zhejiang University of Technology, 2020 [张蕊. 杀菌剂霜霉威对斑马鱼胚胎发育和脂质代谢的影响. 硕士学位论文. 杭州: 浙江工业大学, 2020]

6 Zhang W J, Luo S L, Fan R Q, et al. Combined toxic effects of carbendazim and difenoconazole on SK-N-SH cells (in Chinese). Asian J Ecotoxicol, 2022, 17: 373–382 [张婉君, 罗荪琳, 范瑞祺, 等. 多菌灵和苯醚甲环唑对SK-N-SH细胞的联合毒性效应. 生态毒理学报, 2022, 17: 373–382]

7 Hu Y, Wang W, Liu W F. Cumulative exposure dietary risk assessment of pyrethroid pesticide residues in vegetables in Guizhou based on probability method (in Chinese). World Pestic, 2023, 45: 43–47 [胡毅, 王微, 刘文锋. 基于概率法评估贵州蔬菜中拟除虫菊酯类农药残留累积膳食暴露风险. 世界农药, 2023, 45: 43–47]

8 Ye M L, Nie J Y, Xu G F, et al. Research status and prospects of risk assessment of pesticide residues in fruits (in Chinese). Guangdong Agric Sci, 2016, 43: 117–124 [叶孟亮, 聂继云, 徐国锋, 等. 果品农药残留风险评估研究现状与展望. 广东农业科学, 2016, 43: 117–124]

9 Chen Z J. Safety evaluation for pesticide residue in vegetables based on monitoring big data (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2019 [陈志军. 基于监测大数据的蔬菜中农药残留安全性评价. 博士学位论文. 北京: 中国农业科学院, 2019]

10 Jardim A N O, Brito A P, van Donkersgoed G, et al. Dietary cumulative acute risk assessment of organophosphorus, carbamates and pyrethroids insecticides for the Brazilian population. Food Chem Toxicol, 2018, 112: 108–117

11 OECD, Organization for Economic Co-operation and Development Guidelines for the Testing of Chemicals. (2021). Test No. 509: crop field trial. Available from URL: http://www. oecd.org/termsandconditions/

12 SANTE, Analytical quality control and method validation procedures for pesticide residues analysis in food and feed. 2021. SANTE/11312/2021. Available from URL: https://food.ec.europa.eu/document/download/d4786faf-c574-4222-a5c6-45086b3920b8_en?filename=pesticides_mrl_guidelines_wrkdoc_2021-11312.pdf.

13 Quan R, Li M, Liu Y, et al. Residues and enantioselective behavior of cyflumetofen from apple production. Food Chem, 2020, 321: 126687

14 Liu N, Dong F, Chen Z, et al. Distribution behaviour of acaricide cyflumetofen in tomato during home canning. Food Addit Contam A, 2016, 33: 824–830

15 Chen X, Dong F, Liu X, et al. Chiral determination of a novel acaricide cyflumetofen enantiomers in cucumber, tomato, and apple by HPLC. J Sep Sci, 2013, 36: 225–231

16 Li M, Liu X, Dong F, et al. Determination of cyflumetofen residue in water, soil, and fruits by modified quick, easy, cheap, effective, rugged, and safe method coupled to gas chromatography/tandem mass spectrometry. J Sep Sci, 2012, 35: 2743–2749

17 Zhu X, Gu X. Bayes factor and its applications (in Chinese). Psychol Tech Appl, 2023, 11: 514–527 [朱训, 顾昕. 贝叶斯因子及其应用. 心理技术与应用, 2023, 11: 514–527]

18 Liang F, Paulo R, Molina G, et al. Mixtures of g priors for Bayesian variable selection. J Am Stat Assoc, 2008, 103: 410–423

19 Li G Y, Gu X. Application and development of bayesian statistical methods (in Chinese). Psychol Explor, 2021, 41: 466–473 [李贵玉, 顾昕. 贝叶斯统计方法的应用与现状. 心理学探新, 2021, 41: 466–473]

20 JASP Team. JASP (Version 0.13.1) Computer software, 2020. Available from URL: https://jasp-stats.org/

21 Pfadt J M, Bergh D, Sijtsma K, et al. A tutorial on Bayesian single-test reliability analysis with JASP. Behav Res, 2023, 55: 1069–1078

22 Bergh D, Clyde M A, Gupta A R K N, et al. A tutorial on Bayesian multi-model linear regression with BAS and JASP. Behav Res, 2021, 53:

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

2351–2371

23 Fabreti L G, Höhna S. Convergence assessment for Bayesian phylogenetic analysis using MCMC simulation. Methods Ecol Evol, 2022, 13: 77–90

24 Niu Y, Forecast mortality with consideration of model instability-based on bayesian mixture model (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Nanchang: Jiangxi University of Finance and Economics, 2023 [牛苑. 考虑模型不确定性的人口死亡率研究. 硕士学位论文. 南昌: 江西财经大学, 2023]

25 Cowles M K, Carlin B P. Markov chain monte carlo convergence diagnostics: a comparative review. J Am Stat Assoc, 1996, 91: 883–904

26 Zhang Z Y, Xu J, Jiang K, et al. Research on the application of Bayesian statistical model based on MCMC method (in Chinese). J Jingdezhen Univ, 2024, 39: 70–74 [张宗宇, 徐军, 姜奎, 等. 基于MCMC方法的贝叶斯统计模型应用研究. 景德镇学院学报, 2024, 39: 70–74]

27 Chen J J. Parameter estimation of random discretized lotka-volterra model based on MCMC algorithm and application in automobile market forecasting (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Yining: Yili Normal University, 2025 [陈进晶. 基于MCMC算法的随机离散化Lotka-Volterra模型参数估计及其在汽车市场预测中的应用. 硕士学位论文. 伊宁: 伊犁师范大学, 2025]

28 Benford D, Halldorsson T, Jeger M J, et al. The principles and methods behind EFSA's Guidance on Uncertainty Analysis in Scientific Assessment. EFS2, 2018, 16

29 Zhu T Q. Beyesian molecular dating with genomic data (in Chinese). Sci Sin Vitae, 2019, 49: 472–483 [朱天琪. 使用基因组数据进行贝叶斯物种分化时间估计. 中国科学: 生命科学, 2019, 49: 472–483]

30 Wan F F. Application of Bayesian and maximum likelihood methods in studying predator-prey interactions (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Kaifeng: Henan University, 2024 [万芬芬. 贝叶斯和极大似然方法在研究捕食者–猎物相互作用中的应用. 硕士学位论文. 开封: 河南大学, 2024]

31 Dalla Valle L, Giudici P. A Bayesian approach to estimate the marginal loss distributions in operational risk management. Comput Stat Data Anal, 2008, 52: 3107–3127

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323

Probabilistic assessment of cyflumetofen dietary exposure risks by a Bayesian framework with Markov Chain Monte Carlo

LIU ShuTian[1,2], WU ManNi[2], LI XianBin[3], ZHANG Bin[1*], CHENG YouPu[1] & CHEN ZengLong[2*]

[1] *College of Horticulture and Landscape Architecture, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China*
[2] *State Key Laboratory of Animal Biodiversity Conservation and Integrated Pest Management, Institute of Zoology, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China*
[3] *Institute of Pesticide Inspection, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Beijing 100125, China*
* *Corresponding authors, E-mail: chenzenglong@ioz.ac.cn; zhangbin370825@163.com*

Traditional probabilistic assessment methods based on @Risk and Crystal Ball focus solely on the randomness of input variables, while neglecting the uncertainty of core model parameters (e.g., α, β, σ in residue regression models). To address this limitation, this study proposes a hybrid approach integrating Bayesian Markov Chain Monte Carlo (MCMC) simulation with probabilistic modeling for quantifying the dietary risk of cyflumetofen in strawberries. A Bayesian linear regression model for pesticide residues was constructed using JASP to obtain the posterior distributions of parameters. MCMC chains of α, β, and σ were extracted in R software, and posterior predictive concentration samples incorporating both parameter and residual uncertainties were generated. These samples were imported into Crystal Ball, where dietary exposure and hazard quotient were calculated by combining strawberry consumption data (Gamma distribution) and human body weight data (normal distribution). After 100,000 Monte Carlo simulations, the 95th percentile (P95) of the hazard quotient distribution was derived and further validated by comparison with traditional methods. Results showed that traditional probabilistic assessment methods based on @Risk and Crystal Ball overestimated the dietary risk of cyflumetofen due to the omission of model parameter uncertainty. The hybrid approach proposed in this study can effectively quantify the impact of parameter uncertainty, and provide a more accurate and scientific basis for risk assessment for the safety regulation of cyflumetofen in strawberry production.

Bayesian, MCMC, probabilistic simulation, residue risk, dietary exposure

doi: 10.1360/SSV-2025-0323

https://www.sciengine.com/doi/10.1360/SSV-2025-0323