DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20251112005
引用格式: 李莉, 梁怀新, 牛蓓, 等. 机器学习预测渤海中麻痹性贝类毒素及其膳食风险评估[J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(7): 288–294.
LI L, LIANG HX, NIU B, *et al*. Prediction of paralytic shellfish poisoning in the Bohai Sea by machine learning and its dietary risk assessment [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2026, 17(7): 288–294. (in Chinese with English abstract).

机器学习预测渤海中麻痹性贝类毒素及其膳食风险评估

李　莉[1], 梁怀新[1*], 牛　蓓[2], 刘长青[2], 刘　斌[1], 巴　桑[3]

[1. 秦皇岛市疾病预防控制中心(秦皇岛市卫生监督所), 秦皇岛　066000;
2. 河北省疾病预防控制中心, 石家庄　050000; 3. 西藏自治区阿里地区疾病预防控制中心, 阿里　859000]

摘　要: 目的　实现渤海中麻痹性贝类毒素(paralytic shellfish poisoning, PSP)预测, 分析与 PSP 产生有关的金属污染物元素, 并完成 PSP 的膳食风险评估。**方法**　本研究对 2018—2024 年渤海领域石房蛤毒素(saxitoxin, STX)、膝沟藻毒素(gonyautoxins2/3/4, GTX2、GTX3、GTX4)、新石房蛤毒素(neosaxitoxin, neoSTX)共 5 种 PSP 检出率相对较高的样本进行检测分析, 使用最大信息系数(maximal information coefficient, MIC)计算与贝体内金属多元素含量的相关性、冗余性和互补性, 并基于此进行金属元素特征选择, 对筛选后的特征子集使用 5 种经典机器学习模型实现 PSP 含量预测。实验采用十折交叉验证结果, 用配对 *t* 检验分析, 用 95%置信区间(confidence interval, CI)比较数据集的预测准确率。最后采用点评估法针对 5 个年龄段的人群的环渤海领域毛蚶和海虹两种贝类膳食风险进行的评估。**结果**　使用特征选择方法可有效筛选与 PSP 含量有关的金属多元素危害因子, 随机森林(random forest, RF)模型使用特征子集预测膝沟藻毒素中 GTX3 的平均绝对误差(mean absolute error, MAE)、均方根误差(root mean square error, RMSE)下降最大, 分别降低了 8.0% (95%CI: –0.0821~–0.0779, P<0.05)和 9.1% (95%CI: –0.0997~–0.0823, P<0.05), RF 模型在预测中具有更低的预测误差, MAE、RMSE 分别为 0.147 和 0.183。5 个年龄段的人群食用环渤海领域毛蚶和海虹贝类膳食风险均未超过限值。**结论**　本研究提出的融合 MIC 与冗余-互补性评估的动态特征选择方法, 能有效挖掘金属多元素间的协同与拮抗作用, 显著提升 PSP 预测精度, 同时 5 个年龄段人群相关贝类的膳食风险均处于安全水平, 为渤海贝类食品安全管控提供了科学支撑与技术参考。

关键词: 麻痹性贝类毒素; 金属多元素; 预测; 特征选择; 机器学习

收稿日期: 2025-11-12
基金项目: 河北省医学科学研究课题计划资助项目(20231899); 国家卫健委能力建设和继续教育中心慢病管理研究课题项目(GWJJMB202510030036)
第一作者: 李莉(1976—), 女, 副主任技师, 主要研究方向为公共卫生与食品安全风险预警。E-mail: lilicdc@163.com
***通信作者:** 梁怀新(1992—), 男, 硕士, 主管技师, 主要研究方向为机器学习与食品风险预测。E-mail: lianghuaixin@126.com

Prediction of paralytic shellfish poisoning in the Bohai Sea by machine learning and its dietary risk assessment

LI Li[1], LIANG Huai-Xin[1*], NIU Bei[2], LIU Chang-Qing[2], LIU Bin[1], BA Sang[3]

[1. *Qinhuangdao Center for Disease Control and Prevention* (*Qinhuangdao Health Supervision Institute*), *Qinhuangdao* 066000, *China*; 2. *Hebei Center for Disease Control and Prevention*, *Shijiazhuang* 050000, *China*; 3. *Xizang Ali Center for Disease Control and Prevention*, *Ali* 859000, *China*]

ABSTRACT: Objective　To predict the paralytic shellfish poisoning (PSP) in the Bohai Sea, explore the correlation between foodborne multi metallic elements contaminants and the levels of PSP, and complete the dietary risk assessment of PSP. **Methods**　This study analyzed samples with relatively high detection rates of 5 kinds of PSP, including saxitoxin (STX), gonyautoxins2/3/4 (GTX2, GTX3, GTX4) and neosaxitoxin (neoSTX), collected in the Bohai Sea from 2018 to 2024. The maximal information coefficient (MIC) was used to analyze the correlation, redundancy and complementarity with the multi metallic element content in bivalves. Based on this, feature selection for multi metallic elements was conducted, and 5 kinds of classical machine learning models to predict PSP levels was utilized. The experiments employed 10-fold cross-validation, paired *t*-tests and compared the prediction accuracy using a 95% confidence interval (CI). Finally, the point assessment method was used to evaluate the dietary risks of 2 kinds of shellfish, Manila clams and mussels, in the Bohai Sea region for 5 different age groups. **Results**　The feature selection method effectively identified multi metallic element hazard factors related to PSP content. The random forest (RF) model showed the largest reductions in mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE) for predicting GTX3 of gonyautoxin, with reductions of 8.0% (95%CI: –0.0821 to –0.0779, $P<0.05$) and 9.1% (95%CI: –0.0997 to –0.0823, $P<0.05$) respectively. The RF model exhibited lower predictive errors, with MAE and RMSE values of 0.147 and 0.183 respectively. The dietary risks of consuming Manila clams and mussels from the Bohai Sea area were acceptable for people in all 5 age groups. **Conclusion**　The dynamic feature selection method proposed in this study, which integrates MIC and redundancy-complementarity evaluation, can effectively uncover synergistic and antagonistic effects among multiple metal elements, significantly improving PSP prediction accuracy. Meanwhile, the dietary risks of relevant bivalves for all 5 age groups remain within safe levels, providing scientific support and technical reference for the safety management of bivalves in the Bohai Sea.

KEY WORDS: paralytic shellfish poisoning; multi metallic elements; prediction; feature selection; machine learning

0　引　言

麻痹性贝类毒素(paralytic shellfish poisoning, PSP)是一种有害的神经性生物毒素[1], 可导致海洋生物生理活性降低甚至大量死亡[2]。贝类滤食有毒藻将毒素残留在体内, 人类食用含有 PSP 的贝类水产品, 毒素经由食物链向高营养级生物传递, 从而导致中毒等严重的食源性疾病[3], 采用适宜技术方法对食源贝类中 PSP 的监测预警具有重要意义。

随着计算机科学发展, 基于数据驱动的机器学习方法可有效进行基于多源变量的贝类毒素预测, 现有研究主要聚焦于外源性环境因素构建预测模型, 例如基于水温、pH、生化需氧量、总氮总磷等水质参数[4–7], 通过相关性分析筛选特征并实现毒素含量或污染风险预测。这些研究为 PSP 预警提供了基础思路, 但仍存在明显局限: 特征选择多依赖单一相关性分析[8], 忽略了污染物间复杂的协同与拮抗作用, 导致筛选的特征子集存在冗余或信息缺失, 影响预测稳定性。贝类体内 PSP 的代谢是一个复杂的过程, 金属元素在食物链中具有稳定性和积蓄性[9], 与贝类毒素代谢和合成过程密切相关, 是研究 PSP 预测的有效特征[10–11]。PSP 与金属多元素污染物间的协同与拮抗作用贯穿代谢过程[12], 污染物间的交互作用呈现复杂关联[13], 因此仅利用相关性选择的特征子集具有局限性。此外, 外源性环境因素易受季节变化、气象灾害等突发情况影响, 波动剧烈, 导致模型泛化能力不足。

为解决上述问题, 本研究提出一种基于贝体内源性金属多元素与动态特征选择的 PSP 预测方法, 核心创新点

如下: (1)突破现有研究依赖外源性环境变量的局限, 聚焦与贝类代谢体系紧密关联的 17 种金属元素, 利用其稳定性优势提升预测模型的鲁棒性; (2)提出融合最大信息系数与冗余-互补性评估的动态特征选择方法, 深度挖掘金属多元素间的协同与拮抗作用, 避免单一相关性筛选导致的信息偏差; (3)构建“特征筛选-模型预测-风险评估”的完整技术链条, 在提升 PSP 预测精度的同时, 针对不同年龄段人群开展膳食风险评估, 为食品安全管控提供全流程支撑。本研究方法在 2018—2024 持续监测的 5 种 PSP 的数据集上进行实验, 并进行膳食风险评估。并通过建立精准高效的 PSP 预测模型, 明确关键影响金属元素及人群膳食安全边界, 不仅丰富了内源性特征用于贝类毒素预测的研究方法, 更能为环渤海地区贝类养殖产业提质、食品安全监管精准施策及公众健康防护提供重要理论依据与技术支撑, 对保障海洋生态安全与食品链安全具有重要现实意义。

1 材料与方法

1.1 数据来源

本研究对象采自 2018—2024 年渤海领域河北秦皇岛地区养殖与市售环节多种贝类水产样品, 筛选样本 76 份, 本研究将污染物数据集划分为 10 个子集, 其中 8 个子集作为训练集, 2 个子集作为测试集。将 10 次运行的误差评价指标取均值, 以此作为模型性能的评估结果。依据国家食品安全检测标准, 采用电感耦合等离子体质谱法(inductively coupled plasma mass spectrometry, ICP-MS)检测硼(B)、锂(Li)、铝(Al)、钒(V)、总铬(Cr)、锰(Mn)、镍(Ni)、铜(Cu)、锌(Zn)、硒(Se)、钼(Mo)、镉(Cd)、锑(Sb)、钡(Ba)、锡(Sn)、铅(Pb)、汞(Hg) 17 种多元素, 采用液相色谱-串联质谱法(liquid chromatography-tandem mass spectrometry, LC-MS/MS)检测包括石房蛤毒素(saxitoxin, STX)、膝沟藻毒素(gonyautoxins2/3/4, GTX2、GTX3、GTX4)、新石房蛤毒素(neosaxitoxin, neoSTX)共 5 种检出率相对较高[14]的 PSP, 污染物含量为未检出的情况采用检出限的 1/2 计。

1.2 仪器与设备

NexION300X 型电感耦合等离子体质谱仪、Altus A-30 型液相色谱-串联质谱仪[珀金埃尔默企业管理(上海)有限公司]; AFS-230E 型原子荧光光谱仪(北京海光仪器有限公司); AS19 阴离子色谱柱(4 mm×250 mm)[沃特世科技(上海)有限公司]; BT-124S 型万分之一电子分析天平(北京赛多利斯仪器系统有限公司)。

1.3 材料与试剂

硝酸(优级纯, 国药集团化学试剂有限公司); 甲醇(色谱纯, 批号 G2371440, 德国 CNW 科技公司); 碳酸铵(批号 101864266)、正己烷(批号 20220401)[优级纯, 阿拉丁试剂(上海)有限公司]。

1.4 检测方法

17 种多元素检测严格依据 GB 5009.268—2025《食品安全国家标准 食品中多元素的测定》中第一法 电感耦合等离子体质谱法, 5 种 PSP 检测依据 GB 5009.213—2016《食品安全国家标准 贝类中麻痹性贝毒的测定》LC-MS/MS。

1.5 质量控制

本研究中在样本采集、保存、前处理、检测、报告全过程质量控制均依据 GB/T 27404—2008《实验室质量控制规范 食品理化检测》标准要求严格执行, 其中检测环节采用添加样品空白、样品外部质控及加标回收方式控制实验结果准确性。

1.6 动态特征选择方法

为了深入研究多元素污染物特征间的关联, 提取对 PSP 预测有高价值的金属多元素, 本研究将实验方法得到的数据进行数据预处理后, 进行关键特征筛选, 其中特征间相关性评估采用最大信息系数(maximal information coefficient, MIC)[15]作为一种有效的变量间相关性度量方法。MIC 能够测量两个变量间的线性、非线性关系、函数关系以及非函数依赖关系等[16]。为了深入衡量污染物间协同和拮抗作用, 本研究定义了冗余度和互补度, 见公式(1)~(2)。特征互补性(C_f)定义为候选特征(f)与目标值(Y)之间的相关性 MIC(f,Y), 以及候选特征与已选子集(F_s)的平均冗余度(R_f)的比值, 从而能够动态地更新。平均冗余度R_f和互补性(C_f)的定义如公式(1)~(2):

$$R_f = \frac{\sum_{i=1}^{|F_s|} \mathrm{MIC}(f, f_i)}{|F_s|} \tag{1}$$

$$C_f = \frac{\mathrm{MIC}(f, Y)}{R_f} \tag{2}$$

式中: $|F_s|$为集合 F_s 中特征的数量; f_i为第 i 个特征。

首先计算全部金属多元素特征与 PSP 含量之间的 MIC, 并将这些特征按照 MIC 由大到小进行排序。然后, MIC 值最大的特征($f_{\max}$)加入已选特征子集(F_c)。F_c 中的特征按照互补性(C_f)的大小降序排序, 将 C_f最高的特征(f')加入已选特征子集(F_s)中组成新的集合(F_s'), 若 $\mathrm{MAE}(F_s') \leqslant \mathrm{MAE}(F_s)$, 则将特征 f'加入已选特征子集 F_s, 并从候选特征集 F_c 中删除 f'; 采用基于随机森林(random forest, RF)方法比较子集 F_s 与 F_s' 对应的平均绝对误差(mean absolute error, MAE), 若 $\mathrm{MAE}(F_s') > \mathrm{MAE}(F_s)$, 则将 F_c 中下一个特征加入集合 F_s 中判断其误差大小。

1.7 有效性验证方法

为验证本研究方法有效性, 最小绝对收缩和选择算

子(least absolute shrinkage and selection operator, Lasso)、岭回归(ridge regression, RR)、极端随机森林(extra trees, ET)、梯度提升树(eXtreme gradient boosting, XGBoost)、RF 5 个模型在 MAE 指标上进行对比实验。本研究采用十折交叉验证法评估模型性能和泛化能力。

1.8　模型评价指标

为了评估模型的预测性能, 本研究使用 MAE 和均方根误差(root mean square error, RMSE)作为预测模型的评价指标, 其计算公式(3)~(4)如下:

$$\mathrm{MAE}=\frac{1}{N_{\mathrm{test}}}\sum_{j=1}^{N_{\mathrm{test}}}\left|y_{\mathrm{test}}^{j}-\hat{y}_{\mathrm{test}}^{j}\right| \tag{3}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{N_{\mathrm{test}}}\sum_{j=1}^{N_{\mathrm{test}}}(y_{\mathrm{test}}^{j}-\hat{y}_{\mathrm{test}}^{j})^{2}} \tag{4}$$

式中: N_{test} 为测试集的样本数量; y_{test}^{j} 和 $\hat{y}_{\mathrm{test}}^{j}$ 分别为第 j 个测试样本 PSP 含量的真实值和模型的预测值。MAE 和 RMSE 越小, 表明真实值与预测值之间的偏差越小, 即模型的预测性能越好。

1.9　麻痹性贝类毒素膳食风险评估

为了进一步评估 PSP 膳食风险, 本研究使用急性膳食暴露的点评估[17]模型对可能存在膳食风险的毛蚶和海虹两类贝类进行风险评估。为统一评估标准, 计算检测样品中 PSP 的总毒力 STXeq[18], 以 μg STXeq/100 g 表示, 计算如公式(5)所示:

$$\mathrm{STXeq}=\sum_{i=1}^{n}x_i\times p_i \tag{5}$$

式中: x_i 为各 PSP 的含量, mg/kg; p_i 为 PSP 的毒性因子, 取自文献[18]; n 为样品个数。

采用国际公认的每日摄入量测算方式, 构建适用于 2 种 PSP 的急性膳食暴露点评估模型。模型以所有检出贝类品种中的最大残留量作为评估依据, 据此分别计算秦皇岛市居民因食用贝类所摄入的 PSP 的急性膳食暴露量(acute dietary exposure, EXPa), 计算如公式(6)所示:

$$\mathrm{EXPa}/(\mu g\cdot kg^{-1}\cdot d^{-1})=\frac{\mathrm{LP}\times\mathrm{HR}}{\mathrm{BW}\times 100}\times f \tag{6}$$

式中: LP 为人群每日消费量, g/d, 取值参考文献[19]; HR 为贝类可食用部分中 PSP 的平均浓度, mg/kg; f 为加工因子, 取值 1; BW 为人群平均体重, kg, 对 18~29、30~44、45~59、60~69 及 70 岁以上的 5 个不同年龄段的成年人膳食风险进行评估, 体重取值参考文献[19], 其中 5 个年龄段的平均体重取值为男性和女性体重均值, 分别为 55.25、60.30、60.05、57.90、54.75 kg。本研究中, 贝类毒素残留数据为各品种中的平均值。根据评估对象的 EXPa 计算得到急性膳食暴露风险指数%ARfD, 用来对急性膳食暴露评估进行评价, 计算如公式(7)所示:

$$\%\mathrm{ARfD}=\frac{\mathrm{EXPa}}{\mathrm{ARfD}}\times 100\% \tag{7}$$

式中: ARfD 为急性参考剂量(acute reference dose)[20]。依据欧洲食品安全局的相关规定[21], 针对 STX 设定的 ARfD 为 0.5 μg STX 当量/kg 体重。当%ARfD≤1 时, 表明该人群对 PSP 的急性膳食暴露水平处于安全区间, 不会对身体健康构成风险; 若%ARfD>1, 则意味着人群急性膳食暴露水平超出安全范围。

1.10　数据处理

数据分析使用 Python 3.9 编程实现, 结果连续变量以均值表示。结果采用配对 t 检验分析, 用 95%置信区间(confidence interval, CI)比较数据集的预测误差。以 $P<0.05$ 为差异有统计学意义, 检验水准 $\alpha=0.05$(双侧)。

2　结果与分析

2.1　污染物间相关性分析

本研究采用 MIC 方法评估特征间关系, 并使用 Python 编程语言生成了污染物间相关性热图。由图 1 特征与目标值之间的 MIC 可知, STX、GTX3 及 GTX4 与多数金属元素有相对较高相关性, Li、Al、V、Mn、Ni、Cu、Se、Cd、Ba、Sn、Pb 元素与多数目标值之间具有强相关性。该结果表明 MIC 能够识别与目标值之间相关性较高的特征。但仅基于 MIC 的特征选择方法筛选的冗余特征较多, 且由于与目标值相关性较低的特征会降低模型的准确性, 因此对所有特征的 MIC 降序排序后, 删除了后 20%相关度较低的特征。

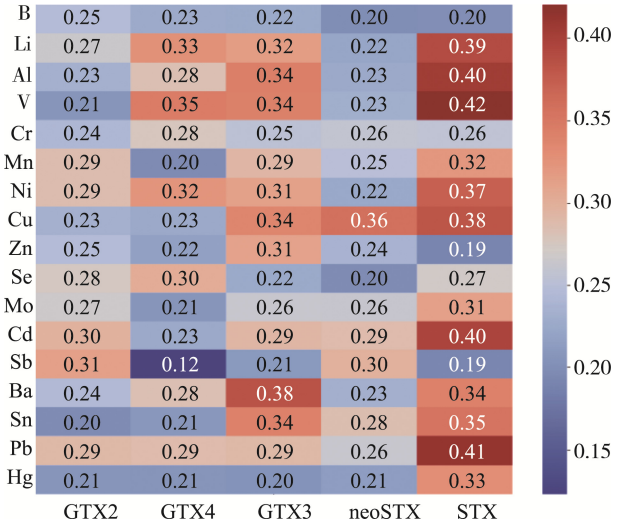


图 1　特征与目标值之间的 MIC 热图
Fig.1　Heatmap of MIC between features and target values

2.2　特征选择结果

为了验证本研究特征选择在 PSP 预测中的有效性, 表 1 对比了特征选择前后的模型预测 PSP 的 MAE 和 RMSE, 并采用平均值代表多种 PSP 预测的综合预测效果。

表 1 使用特征选择前后的结果对比
Table 1 Comparison of results before and after using feature selection

数据集	MAE(筛选前)		MAE(筛选后)		RMSE(筛选前)		RMSE(筛选后)	
	XGBoost	RF	XGBoost	RF	XGBoost	RF	XGBoost	RF
GTX2	0.212	0.202	0.302	0.293	0.256	0.223	0.354	0.354
GTX4	0.026	0.028	0.009	0.010	0.033	0.034	0.027	0.028
GTX3	0.249	0.248	0.144	0.168	0.310	0.313	0.195	0.222
neoSTX	0.220	0.181	0.193	0.171	0.267	0.206	0.221	0.198
STX	0.153	0.121	0.091	0.094	0.183	0.143	0.125	0.122
平均值	0.172	0.156	0.148	0.147	0.210	0.184	0.184	0.183

相比完整特征集，特征选择后 XGBoost 模型预测 GTX3 的 MAE、RMSE 下降最大，分别降低了 10.5% (95%CI: –0.1073~–0.1027, P<0.05)和 11.5%；预测 neoSTX 的 MAE 和 RMSE 下降水平次之，分别最高下降了 6.2% (95%CI: –0.0635~–0.0605, P<0.05) 和 5.8% (95%CI: –0.0558~–0.0362, P<0.05)。RF 模型使用特征子集预测 GTX3 的 MAE、RMSE 下降最大，分别降低了 8.0% (95%CI: –0.0821~–0.0779, P<0.05) 和 9.1% (95%CI: –0.0997~–0.0823, P<0.05)；预测 GTX4、neoSTX、STX 的 MAE 和 RMSE 均分别最高有 2.7% (95%CI: –0.0291~–0.0249, P<0.05) 和 2.1% (95%CI: –0.0251~–0.0169, P<0.05)的下降。通过计算多毒素数据预测平均值比较综合预测效果，XGBoost 与 RF 模型在动态特征选择后预测误差 MAE、RMSE 平均值接近。RF 模型在预测中具有更低的预测误差，MAE、RMSE 分别为 0.147 和 0.183，且对比误差下降幅度可发现两个模型使用 MAE、RMS 分别降低了 2.4%、2.5%和 0.8%、0.024%。XGBoost 与 RF 在预测 GTX2 数据集的 MAE 和 RMSE 均有不同程度上升，可能是该数据集阳性与阴性样本比例失衡，模型学习不够充分导致。

2.3 预测结果比较

为了综合评估本研究方法在 PSP 预测的领域应用有效性，选择了近年发表的文献方法进行了比较，见表 2。预测任务包括了基于环境数据的 PSP 的直接预测、产生有害藻华和富营养化带来的毒素风险预测研究以及对毒素产生与否的预测方法。分析对比结果发现，本研究提出的方法仅使用贝类中内源性金属多元素作为输入，在无环境变量因素的辅助下，在 PSP 预测中可以实现相对较低的预测误差。

表 2 预测任务结果比较
Table 2 Comparison of prediction task results

组别	特征类型	MAE	RMSE
[22]	水温、pH、生化需氧量、悬浮物、总氮、总磷	0.60	0.70
[23]	水质数据和遥感数据	0.96	2.19
[23]	水质数据和遥感数据	0.80	0.97
[24]	低海面温度	7.20	-
本研究方法	贝体内食源性金属多元素	0.15	0.18

注: -表示不含对应评价值。

2.4 风险评估结果

本研究采用点评估法对当地的 4 种贝类的 PSP 水平进行风险评估，评估参数风险等级结果见表 3~4。

分析表 3 和表 4 可知，两种风险较大的贝类的风险等级均未超过限量要求[25]，毛蚶和海虹的急性风险暴露指数%ARfD 范围分别在 0.33~0.44 以及 0.20~0.27，毛蚶的%ARfD 分数较海虹普遍偏高，两类贝类膳食风险等级全部为安全。

表 3 毛蚶的膳食风险评估结果
Table 3 Dietary risk assessment results of Manila clams

STX 当量/(μg/kg)	人群分组	体重/kg	EXPa/(μg·kg^{-1}·d^{-1})	LP/(g/d)	%ARfD	风险等级
348.61	18~29	55.25	0.2193	34.75	0.44	安全
348.61	30~44	60.30	0.1905	32.95	0.38	安全
348.61	45~59	60.05	0.1669	28.75	0.33	安全
348.61	60~69	57.90	0.1879	31.20	0.38	安全
348.61	≥70	54.75	0.1802	28.30	0.36	安全

表 4　海虹的膳食风险评估结果
Table 4　Dietary risk assessment results of mussels

STX 当量/(μg/kg)	人群分组	体重/kg	EXPa/(μg • kg^{-1} • d^{-1})	LP/(g/d)	%ARfD	风险等级
210.82	18~29	55.25	0.1326	34.75	0.27	安全
210.82	30~44	60.30	0.1152	32.95	0.23	安全
210.82	45~59	60.05	0.1009	28.75	0.20	安全
210.82	60~69	57.90	0.1136	31.20	0.23	安全
210.82	≥70	54.75	0.1090	28.30	0.22	安全

3　讨论与结论

本研究提出一种基于机器学习融合特征选择的渤海贝类中 PSP 预测方法, 研究了贝体内与毒素同代谢体系内稳定存在的食源性金属多元素与 PSP 间的 MIC 相关性, 通过结合每类中候选特征与目标值间的相关性以及候选特征与已选特征间的冗余性和互补性, 进一步考虑金属元素与毒素混合存在的协同与拮抗作用, 提出了一种动态特征选择过程以充分分析特征间的内在联系。结合表 2 中本研究筛选的特征, 并分析筛选的金属元素与毒素关联的文献发现, 本研究特征选择方法可筛选出有效特征, 经对比相关研究证明, Cd、Cr 和 Ni 可引起甲壳类生物细胞凋亡以及 DNA 碱基改变、链断裂和重排, 进而影响毒素代谢[26]; Cu 是必需金属, 作为许多重要蛋白质的辅因子与神经系统有关, 对毒素产生有重要影响[26]; Hg、Ni 对贝类可产生氧化应激作用, 多元素暴露的贻贝具有更高的脱钙能力而影响蛋白质羰基化[27]; 微量元素硒也是影响链状裸甲藻生长的重要因素之一, 对促进藻类最大细胞密度和比生长率及产毒素方面均有影响[28]。此外, 对 Mn 和 Zn 以剂量依赖性方式促进产生神经细胞毒性影响[29–30]。本研究筛选出的与 PSP 相关的金属多元素, 与现有文献报道[25–30]的影响毒素代谢的关键元素高度契合, 验证了动态特征选择方法的合理性。而本研究的核心发现在于, 通过 MIC 分析与冗余互补性评估, 可有效筛选对预测有效的领域中已证实有效的特征要素, 并证实这些元素并非孤立作用, 其协同(如 Cd 与 Hg 强化氧化应激)与拮抗(如 Se 与 Cd 形成复合物)效应可显著影响 PSP 蓄积, 这与多数文献聚焦单一元素毒理的研究形成互补。需要说明的是, 本研究未直接验证上述元素的毒理机制, 而是通过现场监测数据证实其与 PSP 含量的关联性, 与文献报道的机制提供了实际环境中的数据佐证, 也为多元素协同预测 PSP 含量提供了新思路。

另外, 采用点评估法针对两个风险较大的毛蚶和海虹贝类水产品进行了基于不同年龄层的膳食风险评估, 结果均为安全。下一步将细化人群特征, 扩大贝类的种类及毒素种类开展膳食风险评估研究。另外, 本研究结果验证了所提方法可以筛选出与 PSP 产生有直接关联的主要金属元素, 并在领域内预测毒素的研究中取得较低的预测误差。与水质等外源性变量相比, 在贝体内与毒素同一代谢环境下的金属多元素特征选择的有效性, 同时, 本研究方法在特征选择中在相关性基础上进一步评估冗余性与互补性, 有效挖掘到污染物间的协同与拮抗作用, 更符合生化代谢规律, PSP 预测准确性进一步提升, 为 PSP 食品安全风险预测与预警提供一种新的技术方法。

参考文献

[1] TAMELE IJ, SILVA M, VASCONCELOS V. The incidence of marine toxins and the associated seafood poisoning episodes in the african countries of the Indian Ocean and the Red Sea [J]. Toxins, 2019, 11(1): 58.

[2] 杨锡洪, 张丽娜, 解万翠, 等. 水产品中麻痹性贝类毒素(PSP)检测技术的研究进展[J]. 现代食品科技, 2016, 32(12): 366–373.
YANG XH, ZHANG LN, XIE WC, *et al*. Developments in paralytic shellfish toxin (PST)-detection techniques [J]. Modern Food Science and Technology, 2016, 32(12): 366–373.

[3] 宋维佳, 宋秀贤, 俞志明, 等. 海洋中麻痹性贝类毒素的合成转化及其影响因素研究进展[J]. 海洋科学, 2022, 46(9): 117–129.
SONG WJ, SONG XX, YU ZM, *et al*. Research progress on the biosynthesis, transformation, and factorsaffecting paralytic shellfish toxins in the ocean [J]. Marine Sciences, 2022, 46(9): 117–129.

[4] ZHANG SF, ZHANG Y, LIN L, *et al*. iTRAQ-based quantitative proteomic analysis of a toxigenic dinoflagellate *Alexandrium catenella* and its non-toxigenic mutant exposed to a cell cycle inhibitor colchicine [J]. Frontiers in Microbiology, 2018, 16(2): 491.

[5] 李笑语. 基于多源数据的中国近海有害藻华演变特征分析与预测方法构建[D]. 青岛: 中国科学院大学(中国科学院海洋研究所), 2024.
LI XY. Analysis of evolution features and development of predictive models on harmful algal blooms in the China Seas based on multi-source data [D]. Qingdao: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Oceanography, Chinese Academy of Sciences), 2024.

[6] SHIN J, KIM SM. Temporal prediction of paralytic shellfish toxins in the mussel mytilus galloprovincialis using a LSTM neural network model from environmental data [J]. Toxins, 2022, 14(1): 51.

[7] BOUQUET A, LAABIR M, ROLLAND JL, *et al*. Prediction of *Alexandrium* and dinophysis algal blooms and shellfish contamination in french mediterranean lagoons using decision trees and linear regression: A result of 10 years of sanitary monitoring [J]. Harmful Algae, 2022, 115: 102234.

[8] 何明珠. 贝类中脂溶性贝类毒素与重金属的暴露特征及风险评价[D]. 衡阳: 南华大学, 2022.
HE MZ. Exposed features and risk assessment of lipophilics shellfish

toxins and heavy metals in shellfish [D]. Hengyang: Nanhua University, 2022.

[9] DE ARP, FERRARI RG, KATO LS, *et al*. A systematic review on metal dynamics and marine toxicity risk assessment using crustaceans as bioindicators [J]. Biological Trace Element Research, 2022, 200(2): 881–903.

[10] JEAN N, PERIE L, DUMONT E, *et al*. Metal stresses modify soluble proteomes and toxin profiles in two Mediterranean strains of the distributed dinoflagellate *Alexandrium pacificum* [J]. Science of the Total Environment, 2022, 818: 151680.

[11] SANTHOSH K, KAMALA K, RAMASAMY P, *et al*. Unveiling the silent threat: Heavy metal toxicity devastating impact on aquatic organisms and DNA damage [J]. Marine pollution bulletin, 2024, 200: 116139.

[12] ZHAO B, TU DZ, KONG BW, *et al*. Antagonistic effects, sources, and distribution of selenium and toxic metals in fish from selenium-rich and high cadmium areas, Dashan Region, China [J]. Biological Trace Element Research, 2024, 202(12): 5690–5696.

[13] LI C, LUO X, QI YP, *et al*. A new feature selection algorithm based on relevance, redundancy and complementarity [J]. Computers in Biology and Medicine, 2020, 119: 103667.

[14] 刘斌, 赵慧琴, 刘波, 等. 2018—2020 年河北省市售贝类中麻痹性贝类毒素污染状况调查分析[J]. 食品安全质量检测学报, 2021, 12(5): 1746–1752.
LIU B, ZHAO HQ, LIU B, *et al*. Investigation and analysis of paralytic shellfish poison pollution in retail shellfish in Hebei Province from 2018 to 2020 [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2021, 12(5): 1746–1752.

[15] QIN YH, SONG KK, ZHANG NQ, *et al*. Robust NIR quantitative model using MIC-SPA variable selection and GA-ELM [J]. Infrared Physics & Technology, 2023, 128: 104534.

[16] LIANG YI, HE WL, ZHONG WM, *et al*. Objective reduction particle swarm optimizer based on maximal information coefficient for many-objective problems [J]. Neurocomputing, 2018, 281: 1–11.

[17] 王向未, 仇厚援, 张志恒, 等. 食品中膳食暴露评估模型研究进展[J]. 浙江农业学报, 2012, 24(4): 733–738.
WANG XW, CHOU HY, ZHANG ZH, *et al*. Diet exposure assessment methods in food [J]. Acta Agriculturae Zhejiangensis, 2012, 24(4): 733–738.

[18] ZHOU Y, LI S, ZHANG J, *et al*. Dietary exposure assessment of paralytic shellfish toxins through shellfish consumption in Shenzhen population, China [J]. Environmental Science and Pollution Research, 2022, 29(7): 10222–10234.

[19] 马丹, 高丽娜, 张鹏, 等. 天津市市售经济贝类中麻痹性贝类毒素污染状况调查[J]. 水产科技情报, 2025, 52(3): 190–195.
MA D, GAO LN, ZHANG P, *et al*. Investigation on the contamination of paralytic shellfish toxins in economically sold shellfish in Tianjin [J]. Fisheries Science & Technology Information, 2025, 52(3): 190–195.

[20] 刘志伟. 一个新的毒理学阈值———急性参考剂量[J]. 卫生研究, 2003(1): 76–77, 89.
LIU ZW. A new toxicological conggpt-acute reference dose [J]. Journal of Hygiene Research, 2003(1): 76–77, 89.

[21] EFSA. Marine biotoxins in shellfish–saxitoxingroup scientific opinion of the panel on contaminantsin the food chain [J]. The EFSA Journal, 2009(1019): 1–76.

[22] KIM J, KIM H, KIM K, *et al*. Research on the development and application of a deep learning model for effective management and response to harmful algal blooms [J]. Water, 2023, 15(12): 2293.

[23] KARIMIAN H. A novel framework to predict chlorophyll-a concentrations in water bodies through multi-source big data and machine learning algorithms [J]. Environmental Science and Pollution Research, 2023, 30(32): 79402–79422.

[24] STONER O, ECONOMOU T, BROWN AR. Seasonal early warning of impacts of harmful algal blooms on farmed shellfish in coastal waters of scotland [J]. Water Resources Research, 2024, 60(10): e2023WR035635.

[25] 刘培海, 高尧华, 孙灿, 等. 贝类毒素检测方法研究进展及其国内外限量要求比较分析[J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(12): 1–9.
LIU PH, GAO YH, SUN C, *et al*. Research progress on determination methods and comparative analysis on domestic and international limits requirement of shellfish toxin [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2024, 15(12): 1–9.

[26] RANA SVS. Metals and apoptosis: Recent developments [J]. Journal of Trace Elements in Medicine and Biology, 2008, 22(4): 262–284.

[27] MORAIS T, MOLEIRO P, LEITE C, *et al*. Ecotoxicological impacts of metals in single and co-exposure on mussels: Comparison of observable and predicted results [J]. Science of the Total Environment, 2023, 881: 163165.

[28] 史竞园. 我国福建沿海链状裸甲藻(*Gymnodinium catenatum*)毒素组成与环境响应特征研究[D]. 青岛: 中国科学院大学(中国科学院海洋研究所), 2024.
SHI JY. Study on the toxin production and environmental responsecharacteristics of *Gymnodinium catenatum* in the coastal waters of Fujian, China [D]. Qingdao: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Oceanography, Chinese Academy of Sciences), 2024.

[29] ZHOU YY, JING WX, DAHMS HU, *et al*. Oxidative damage, ultrastructural alterations and gene expressions of hemocytes in the freshwater crab *Sinopotamon henanense* exposed to cadmium [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2017, 138: 130–138.

[30] WAQAS W, YUAN Y, SARDAR A, *et al*. Toxic effects of heavy metals on crustaceans and associated health risks in humans: A review [J]. Environmental Chemistry Letters, 2024, 22(3): 1391–1411.

(责任编辑: 安香玉 蔡世佳)