吴江超, 郭金喜, 徐杰, 等. 基于 LC-MS 非靶向代谢组学分析受沙门氏菌污染的椒麻鸡标志代谢物 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(4): 337−347. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025020186
WU Jiangchao, GUO Jinxi, XU Jie, et al. Analysis on Marker Metabolites of Pepper Chicken Contaminated by *Salmonella* based on LC-MS Non-targeted Metabonomics[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(4): 337−347. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025020186

· 分析检测 ·

基于 LC-MS 非靶向代谢组学分析受沙门氏菌污染的椒麻鸡标志代谢物

吴江超[1,2,*], 郭金喜[3], 徐　杰[1,4], 张永松[1], 罗稣静[1], 布合力其·阿布都热西提[4]
（1.喀什大学生命与地理科学学院, 新疆喀什 844000;
2.新疆帕米尔高原生物资源与生态重点实验室, 新疆喀什 844000;
3.新疆维吾尔自治区产品质量监督检验研究所, 新疆乌鲁木齐 830000;
4.新疆海德企业管理服务有限责任公司, 新疆喀什 844000）

摘　要: 为了鉴定沙门氏菌污染椒麻鸡后的标志代谢物，采用液相色谱-质谱联用（Liquid chromatography-mass spectro，LC-MS）非靶向代谢组学分析了沙门氏菌污染组和对照组椒麻鸡的代谢物图谱，并采用随机森林回归分析和逐步多元线性回归用于鉴定沙门氏菌污染椒麻鸡后的关键标志代谢物。在污染度过程中，共鉴定分析了 1475 种不同代谢物，正负离子模式下分别鉴定出 864 种和 611 种代谢物；通过随机森林回归分析选择正负离子模式各前 20 种作为潜在标志代谢物；受试者工作特征曲线（Receiver operating characteris，ROC）分析表明，采用随机森林回归分析鉴定的脒基牛磺酸、牛磺胆酸、5b-鲤胆甾醇硫酸盐、尿苷-5'-单磷酸生物标志物显示与沙门氏菌污染的椒麻鸡具有强相关性，其中尿苷-5'-单磷酸含量明显增高，具有很强的区分受沙门氏菌污染的椒麻鸡和新鲜椒麻鸡的能力，可作为沙门氏菌污染椒麻鸡后的标志代谢物。本研究为开发一种创新方法识别和检测由沙门氏菌引起的食源性污染提供了理论基础。

关键词: 椒麻鸡, LC-MS, 非靶向代谢组学, 沙门氏菌, 标志代谢物
中图分类号: R155.5+5　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)04−0337−11
DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2025020186
本文网刊:

Analysis on Marker Metabolites of Pepper Chicken Contaminated by *Salmonella* based on LC-MS Non-targeted Metabonomics

WU Jiangchao[1,2,*], GUO Jinxi[3], XU Jie[1,4], ZHANG Yongsong[1], LUO Sujing[1], BUHELIQI·Abudurexiti[4]
（1.College of Life and Geographic Sciences, Kashi University, Kashi 844000, China;
2.Key Laboratory of Biological Resources and Ecology of Pamirs Plateau in Xinjiang Uygur Autonomous Region, Kashi 844000, China;
3.Xinjiang Uygur Autonomous Region Institute of Product Quality Supervision and Inspection, Urumqi 830000, China;
4.Xinjiang Haide Enterprise Management Service Co., Ltd., Kashi 844000, China）

Abstract: To identify the marker metabolites of pepper chicken contaminated by *Salmonella*, liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS) was used to analyze the metabolite profiles of pepper chicken contaminated by *Salmonella* and control group, and random forest regression analysis and stepwise multiple linear regression were used to identify the key marker metabolites of pepper chicken contaminated by *Salmonella*. In the process of pollution degree, 1475 different metabolites were identified and analyzed, then 864 and 611 metabolites were identified in positive and negative ion mode respectively. The top 20 kinds of positive and negative ion patterns were selected as potential marker metabolites by

收稿日期: 2025−02−24
基金项目: 新疆帕米尔高原生物资源与生态重点实验室重点项目（XJDX1714-2021-01）; 自治区研究生科研创新项目（XJ2024G249）。
作者简介/通信作者*: 吴江超（1985−）, 男, 硕士, 副教授, 研究方向: 农产品加工, E-mail: wujiangchao2008@163.com。

random forest regression analysis. Receiver operating characteris curve (ROC) analysis showed that the biomarkers of amidinotaurine, taurocholic acid, 5b-carp cholesteryl sulfate and uridine-5'-monophosphate identified by random forest regression analysis showed a strong correlation with *Salmonella*-contaminated pepper chicken, in which the content of uridine-5'-monophosphate was significantly increased, which had a strong ability to distinguish *Salmonella*-contaminated pepper chicken from fresh pepper chicken. It could be used as a marker metabolite after *Salmonella* contamination of pepper chicken. The findings of this study could provide a theoretical basis for developing an innovative method to identify and detect food-borne pollution caused by *Salmonella*.

Key words: pepper chicken; LC-MS; non-targeted metabonomics; *Salmonella*; marker metabolite

椒麻鸡是西北地区一种代表性的特色食品，在其加工及销售环节具有较多的食品安全隐患，也是餐饮中因食品安全问题投诉较多的品类之一，在椒麻鸡的储存和加工过程中，蛋白质变化、脂质氧化，尤其是微生物代谢引起的化学变化会使椒麻鸡及其制品的质地和风味发生劣变，直接影响消费者对产品的选择[1]。

沙门氏菌是家禽及其产品中最常见的食源性病原体之一，已成为中国乃至全球细菌性食物中毒的主要原因[2]，目前检测方法主要有传统常规培养法、免疫学、生物传感器、聚合酶链反应等快速检测方法。然而，传统培养法虽然是金标准，但其准确性高、选择性强，检测周期相对较长，操作繁琐，但样品预处理耗时且复杂[3]，需要至少 1~2 d 时间才能得到阳性结果。生物传感器的非特异性吸附会影响检测结果的准确性，免疫测定需要特异抗体，而 PCR 总是受到功率、成本、空间等因素的限制[4]。因此，要实现病原体的快速检测并非易事，无法满足现代食源性病原体检测的要求。因此，迫切需要开发灵敏、有效、省时、可控的方法，在食品加工过程中污染的早期阶段筛查沙门氏菌。

非靶向代谢组学以发现为目的，主要在于识别生物体中的小分子代谢产物(<1500 Da)，使用现代检测技术从整体角度检测和分析生物体中丰富的代谢产物，同时进行高通量检测分析，最大程度反映总的代谢物信息[5]，该技术已广泛应用于临床诊断[6]、医学[7]、微生物代谢[8]、食品科学[9]、畜牧业[10] 等，具有检测范围广、前处理简单等优势，已被应用于识别与食源性致病菌和食品腐败相关的代谢生物标志物[11]；Jadhav 等[12] 基于蛋白质组学和代谢组学筛选食源性病原体的生物标志物，鉴定出羟基褪黑激素为肠炎沙门氏菌污染的肉类样品的特征生物标志物；Xu 等[13] 利用代谢组学和生物信息学分析确定了 17 个代谢标记物，用于区分鼠伤寒沙门氏菌污染猪肉和自然变质猪肉；Chen 等[14] 采用高通量靶向代谢组学方法，确定了六种代谢物作为生物标记物具有很强的区分受肠炎沙门氏菌污染的鸡肉样本和新鲜鸡肉样本的能力，为开发快速、有效和定量的方法来控制生肉和肉制品中肠炎沙门氏菌污染提供了有价值的信息。

本研究利用液相色谱-质谱联用(Liquid chromatography-mass spectro, LC-MS)技术来表征沙门氏菌在椒麻鸡中的代谢物，采用正交偏最小二乘判别分析(Orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA)模型和随机森林分析新鲜椒麻鸡肉样品和受沙门氏菌污染的椒麻鸡肉样品中代谢物的差异，从而确定椒麻鸡肉中沙门氏菌的潜在代谢物生物标志物。采用 ROC 分析法确定和评估潜在代谢物生物标志物的可靠性。这一结果为开发快速准确检测受沙门氏菌污染的椒麻鸡的新方法提供了理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

椒麻鸡　新疆海德企业管理服务有限责任公司；ATCC29629 沙门氏菌标准菌　新疆农业科学院微生物应用研究所；酵母提取物、胰蛋白胨、琼脂粉　均为生物试剂，北京奥博星生物公司；氯化钠、氢氧化钠　均为分析纯，天津市鑫铂特化工有限公司；乙腈、甲醇　均为色谱纯，美国 Fisher 公司；甲酸　色谱纯，上海梯希爱公司；L-2-氯苯丙氨酸(98.0%)　上海 Aladdin 公司。

TGL-16 高速冷冻离心机　湖南湘仪实验室仪器开发有限公司；TL-48R 高通量组织研磨仪　上海净信公司；SB-800D 超声波清洗机、SCIENTZ-1LS 真空浓缩仪　宁波新芝公司；Vanquish Flex 超高效液相色谱仪、Orbitrap Exploris120 高分辨质谱仪　美国 Thermo 公司。

1.2 实验方法

1.2.1 样品制备　参照文献 [11] 稍作修改，挑取单菌落沙门氏菌于 100 mL LB 液体培养基中，置于摇床 37 ℃ 培养 12 h；吸取 0.5 mL 菌液 3500 r/min 离心，弃去上清液，加入 9 mL 生理盐水梯度稀释 10^{-1}~10^{-8}；将椒麻鸡肉在无菌环境下制成匀浆，取 2 g 椒麻鸡匀浆于 20 mL 顶空瓶中，将 200 μL 菌液分别接种于顶空瓶中，36±1 ℃ 培养 24 h，最终浓度为接种 10^{-6} 的菌悬液(沙门氏菌的数量为 240 CFU/g)；样品分为两组，每组三个平行，未接种的为对照组(ck)，接种的为污染组(S1)。

1.2.2 代谢物提取　参照文献 [15] 稍作修改，称取 50 mg 样品于 2 mL 离心管中；加入 200 μL 预冷的水，加入 2 颗钢珠，放入高通量组织研磨仪中，55 Hz，研磨 60 s，重复本步骤一次；加入 800 μL 甲醇∶乙腈(1∶1, v/v)；放入超声波清洗机中超声 30 min；放入 −20 ℃ 冰箱中冷冻 30 min；12000 r/min、4 ℃ 离心

10 min，取上清液 800 μL，真空浓缩至尽干；加入 150 μL 50% 甲醇（含 5 mg/L 2-氯苯丙氨酸）复溶，涡旋 30 s；12000 r/min、4 ℃ 离心 10 min，取上清液过 0.22 μm 滤膜，过滤液加入到检测瓶中；取样品过滤液各 10~20 μL 混合成一个 QC 样品，用于评价仪器稳定性和数据可靠性。

1.2.3　色谱条件　色谱柱：参照文献 [15] 的方法并作修改，ACQUITY UPLCHSS T3 色谱柱（100A，1.8 μm，2.1 mm×100 mm），流速 0.4 mL/min，柱温 40 ℃，自动进样器 8 ℃，进样量 2 μL。

正负模式流动相：流动相 A 为 0.1% 甲酸水，流动相 B 为乙腈（含 0.1% 甲酸），洗脱梯度如表 1。

表 1　正负模式洗脱梯度

Table 1　Elution gradient in positive and negative modes

时间（min）	B（%）
0	5
1	5
7	95
8	95
8.1	5
12	5

1.2.4　质谱条件　参照文献 [15] 的方法并作修改，加热电喷雾离子源，喷雾电压 3.5 kV/−3.0 kV，鞘气 40 L/min，辅助气 15 L/min，毛细管温度 325 ℃，辅助气温度 300 ℃，一级分辨率 60000，扫描范围 100~1000 m/z，筛选响应前 4 的离子进行二级碎裂，动态排除时间为 8 s，二级分辨率 15000，HCD 碰撞能 30%。

1.2.5　质量控制（Quality control，QC）　测试过程使用等量混合的所有样品溶液作为质控样品。每三个样品加入一个质控样品，以确保检测和分析过程的稳定性和可重复性。

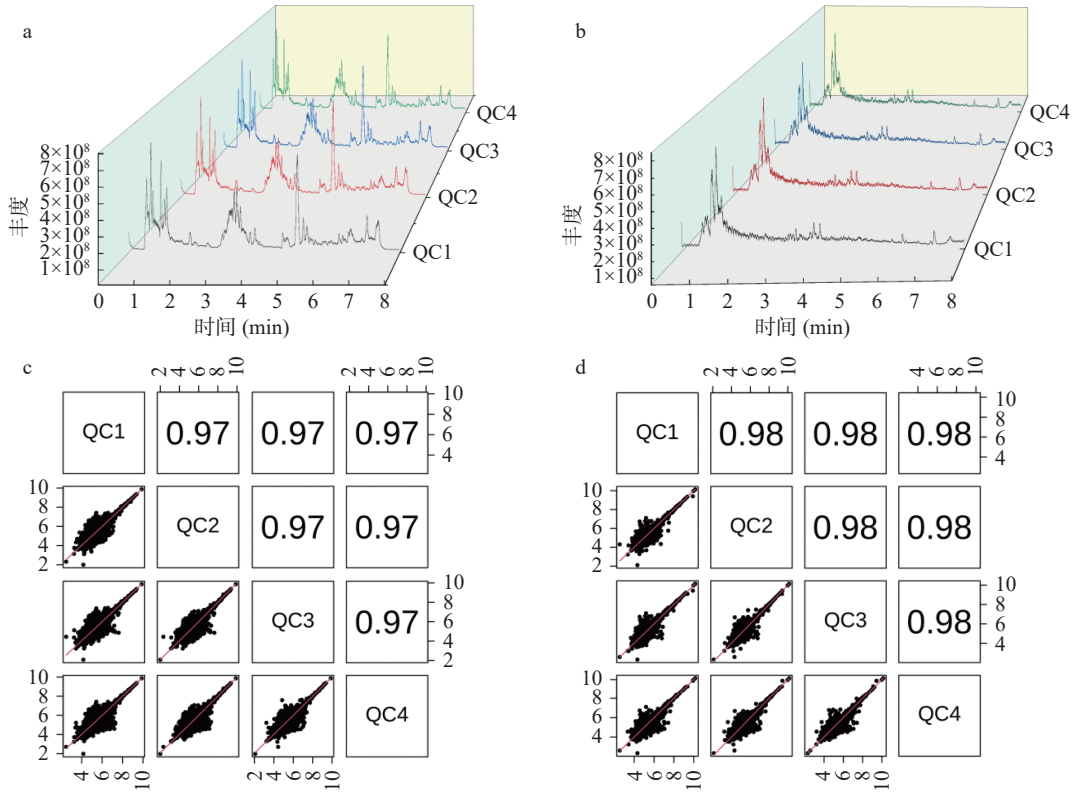
1.3　数据处理

首先将下机的 .raw 格式数据导入商业软件 Compound Discoverer3.3（version 3.3.2.31，Thermo，Waltham，USA），进行峰提取、对齐、矫正等操作，对大于 50% 的 QC 样品中未检出的峰进行过滤，未检出的峰基于软件 Fill Gaps 算法进行缺失值的填充，并进行总峰面积归一化。代谢物的鉴定基于自建库以及 NIST-2020-MSMS 图谱库等进行，通过 R 中 Pheatmap 程序包（V1.0.12）对代谢物丰度值进行聚类分析，采用 R 软件包 Ropls 分别对样本数据进行主成分分析（Principal component analysis，PCA）、OPLS-DA 降维分析。用置换检验方法对模型进行过拟合检验。根据统计检验计算 *P* 值、OPLS-DA 降维方法计算变量重要性投影（Variable importance in the projection，VIP）、差异倍数（Fold change，FC），衡量各代谢物组分含量对样本分类判别的影响强度和解释能力，对差异代谢产物结果进一步通过的机器学习分析（mlr3verse，V0.2.7）和 ROC曲线绘制（pROC，V1.18.2）；通过 clusterProfiler（V4.6.0）对差异物质进行富集分析（Kyoto encyclopedia of genes and genomes，KEGG）；对照组（ck）与污染组（S）样品分别独立测定 3 次，分析结果以平均值±标准偏差表示；采用 OriginPro2024 软件绘小提琴图。

2　结果与分析

2.1　质量控制

基于 LC-MS 非靶向代谢组学，研究了受沙门氏



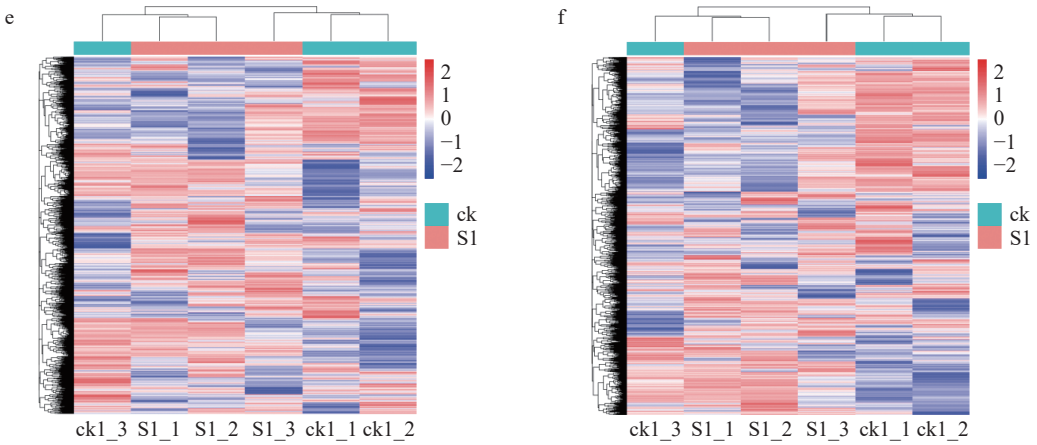


图 1　沙门氏菌污染椒麻鸡样品的质量控制和代谢概况

Fig.1　Quality control and metabolic profile of *Salmonella*-contaminated pepper chicken samples

注:(a)四个质控样品的正离子色谱图;(b)四个质控样品的负离子色谱图;(c)正离子模式质控样品相关性;(d)负离子模式质控样品相关性;(e)正离子模式对所有检测到的峰进行热图聚类;(f)负离子模式对所有检测到的峰进行热图聚类。

菌污染的椒麻鸡样品和对照组样品中的代谢物。将 QC 样本总离子流图(Total ion chromatogram, TIC)进行谱图重叠比较,如图 1a 和图 1b 所示。实验结果表明,各色谱峰的响应强度和保留时间基本重叠,说明在整个实验过程中仪器误差引起的变异较小。数据质量稳定可靠。对 QC 样本进行 Pearson 相关性分析,如图 1c 和图 1d 所示,实验结果表明 QC 样本间的相关性系数分别在 0.97(正离子模式)和 0.98(负离子模式),均在 0.9 以上,说明实验重复性较好。如图 1e、图 1f 所示,所有峰值都经过了平均最大归一化和聚类分析,所有峰值的热图显示了样本在对照组和污染组的不同层次聚类。

2.2　代谢物鉴定与分析

利用 SIMCA 软件对原始复杂数据进行降维处理,保留对数据集差异贡献最大的特征进行 PCA 自动建模分析[16]。沙门氏菌污染组和对照组的 PCA 结果见图 2a 和图 2b。所有样本都在 95% 的置信区间内,正离子的第一主成分(PC1)和第二主成分(PC2)

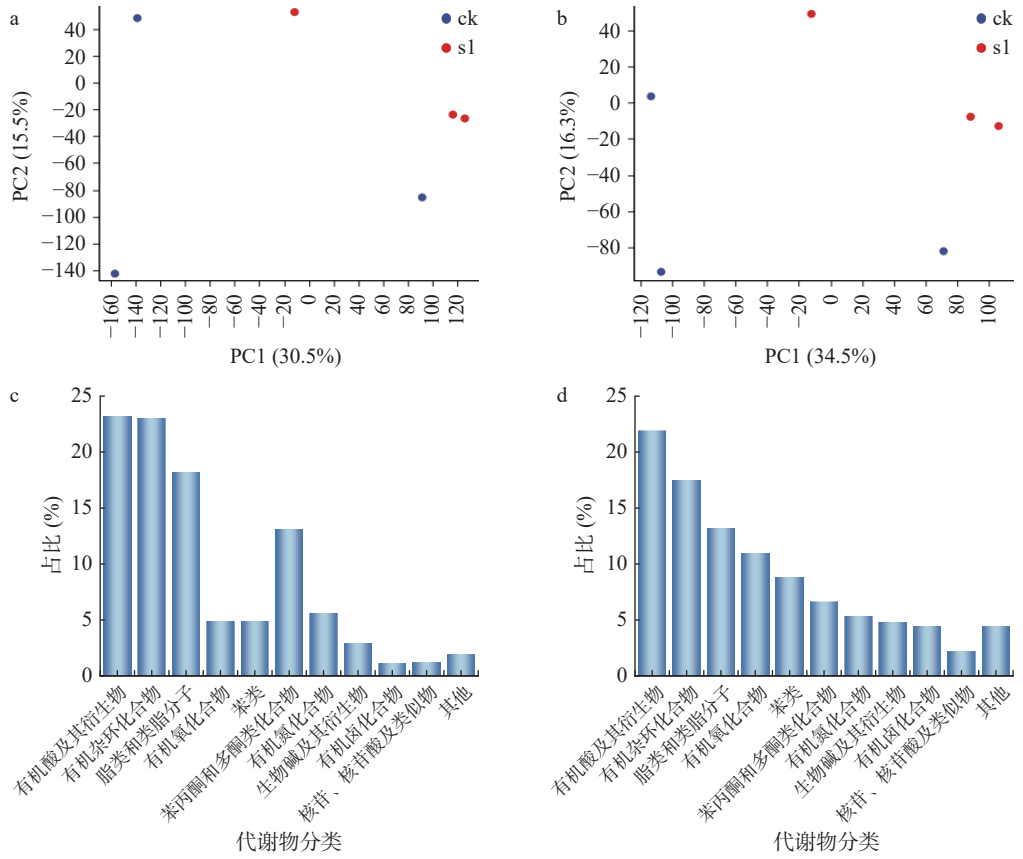


图 2　沙门氏菌污染椒麻鸡样品的 PCA 分析和代谢物分类

Fig.2　PCA analysis and metabolite classification of *Salmonella*-contaminated pepper chicken samples

注:(a)正离子模式 PCA 得分图;(b)负离子模式 PCA 得分图;(c)正离子模式柱状图;(d)负离子模式柱状图。

的贡献率分别为 30.5% 和 15.5%。负离子的第一主成分（PC1）和第二主成分（PC2）的贡献率分别为 34.5% 和 16.3%。同组样本的聚类表明样本之间具有良好的重复性，而不同组样本之间的距离相对较长，表明样本之间具有显著的差异性。

对沙门氏菌污染组和对照组椒麻鸡样本中的代谢物进行了定性和定量分析。正负离子模式下分别鉴定出 864 种（图 2c）和 611 种（图 2d）代谢物，并将其分为 11 类：有机酸及其衍生物、有机杂环化合物、脂类和类脂分子、有机氧化合物、苯类、苯丙酮和多酮类化合物、有机氮化合物、生物碱及其衍生物、有机硫化合物、核苷及核苷酸类似物、其它类。

如图 2c 所示，正离子模式下有机酸及其衍生物是含量最高的代谢物，共观察到 156 种，占所有代谢物的 23.6%；有机杂环化合物是含量第二高的代谢物，共检测到 155 个，占所有代谢物的 23.4%。脂类和类脂分子是含量第三高的代谢物，共检测到 122 种，占所有代谢物的 18.57%；如图 2d 所示，负离子模式下，有机酸及其衍生物是含量最高的代谢物，共观察到 140 种，占所有代谢物的 27.2%；脂类和类脂分子是含量第二高的代谢物，共检测到 132 个，占所有代谢物的 25.6%；有机杂环化合物是含量第三高的代谢物，共检测到 78 种，占所有代谢物的 15.1%。

2.3　差异代谢物的鉴定

差异代谢物的鉴定以 VIP>1 和 *P* value<0.05 为显著性差异代谢物筛选标准。对照组和受沙门氏菌污染组之间的差异物质用火山图表示（图 3a 和图 3b），通过比较对照组和受沙门氏菌污染组样本，正离子模式下共鉴定出 73 个差异物质，其中包括 44 个上调代谢物和 29 个下调代谢物；负离子模式下共鉴定出 46 个差异物质，其中包括 38 个上调代谢物和 8 个下调代谢物。

2.4　OPLS-DA 分析

通过构建 OPLS-DA 模型，以确定椒麻鸡样本中受沙门氏菌污染的潜在代谢生物标记物。OPLS-DA 使用正交信号校正技术，将 X 矩阵信息分解成与 Y 相关和不相关的两类信息，然后过滤掉与分类无关的信息，有助于样本分类和数据集中的无关噪声信息[17]。如图 3c 与图 3d 所示，OPLS-DA 评分图将两组样本分开，表明沙门氏菌污染显著改变了样本的代谢谱。为了评估 OPLS-DA 模型的有效性，进行了 200 次置换检验[18]（图 3e 和图 3f），R^2x 和 R^2y 数值越接近 1，表明建立模型的效果越好[19]。R^2x 和 R^2y 分别为 0.925 和 1.000（正离子模式），0.975 和 1.000（负离子模式），Q^2 值均为 96.7%，均大于 50%；回归线的斜率较大，Q^2 的拟合曲线在 Y 轴上的截距小于 0，R^2Y 为 P<0.05，表明模型具有良好的适应度与可预测性[20]。根据预测的 VIP>1、P<0.05 共筛选出 119 个差异代谢物（表 2）。

2.5　潜在生物标记物的筛选

作为一种机器学习方法，随机森林模型是一种集成学习技术，它使用反演法对预测因子进行分类和

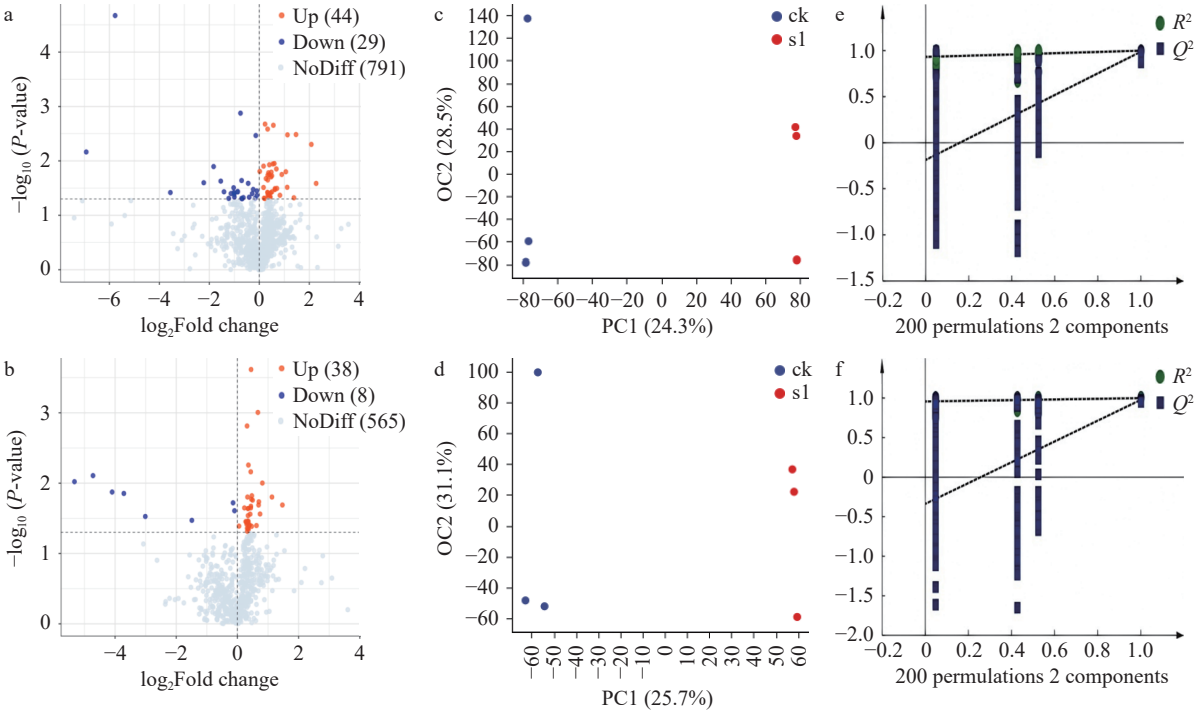


图 3　沙门氏菌污染椒麻鸡样品中代谢物生物标志物的鉴定

Fig.3　Identification of metabolite biomarkers in *Salmonella*-contaminated pepper chicken samples

注：(a)正离子模式代谢物含量不同的火山图；(b)负离子模式代谢物含量不同的火山图；(c)正离子模式 OPLS-DA 得分图；(d)负离子模式 OPLS-DA 得分图；(e)正离子模式 OPLS-DA 模型置换分析；(f)负离子模式 OPLS-DA 模型置换分析。

表 2 沙门氏菌污染椒麻鸡的潜在生物标志物

Table 2 Potential biomarkers of *Salmonella* contaminated pepper chicken

序号	代谢物名称	保留时间(min)	参考离子	代谢物分子式	VIP	*P*-value
1	(+)-γ-氨基-β-羟基丁酸	0.662	$[M+H]^+$	$C_4H_9NO_3$	1.71	0.046
2	4-甲基咪唑	0.696	$[M+H]^+$	$C_4H_6N_2$	1.76	0.049
3	5-[(3-吡啶基甲基)氨基]-1H-吡唑-4-甲酰胺	0.714	$[M+NH_4]^+$	$C_{10}H_{11}N_5O$	1.67	0.049
4	S-甲基-L-半胱氨酸-S-氧化物	0.815	$[M+Na]^+$	$C_4H_9NO_3S$	1.74	0.041
5	尿苷-5'-单磷酸	0.816	$[M+H]^+$	$C_9H_{13}N_2O_9P$	1.86	0.032
6	2, 3-二氢苯并呋喃	1.054	$[M+H]^+$	C_8H_8O	1.66	0.048
7	4-(2-羟基-2-丙基)-2-丙基-1H-咪唑-5-甲酸乙酯	1.083	$[M+H-H_2O]^+$	$C_{12}H_{20}N_2O_3$	1.99	0.003
8	2-氨基-N-环己基乙磺酰胺	1.465	$[M+Na]^+$	$C_8H_{18}N_2O_2S$	1.95	0.002
9	3,6-二甲基-1,4-二氧杂环己烷-2,5-二酮	1.571	$[M+H]^+$	$C_6H_8O_4$	1.86	0.011
10	1-(2-吡啶偶氮)-2-萘酚	1.632	$[M+H]^+$	$C_{15}H_{11}N_3O$	1.76	0.032
11	谷氨酰蛋氨酸	1.685	$[M+H]^+$	$C_{10}H_{18}N_2O_5S$	1.67	0.049
12	N'-羟基-2-甲基-1,3-噻唑-4-甲脒	2.330	$[2M+H]^{2+}$	$C_5H_7N_3OS$	1.80	0.031
13	(6E)-10-庚基-5,8,9-三羟基3,4,5,8,9,10-六氢	2.331	$[M+H]^+$	$C_{16}H_{28}O_5$	1.84	0.014
14	N2-[2-(甲硫基)苯基]-1,3,5-三嗪-2,4-二胺	3.004	$[2M+Na]^+$	$C_{10}H_{11}N_5S$	1.79	0.043
15	γ-谷氨酰苯丙氨酸	3.295	$[M+H]^+$	$C_{14}H_{18}N_2O_5$	1.85	0.038
16	5-(4-甲基-1-哌嗪基)-5-氧代戊酸	3.375	$[M+H]^+$	$C_{10}H_{18}N_2O_3$	1.82	0.047
17	1-(2-喹喔啉基)-1,2,3,4-丁四醇	3.493	$[M+H]^+$	$C_{12}H_{14}N_2O_4$	1.85	0.018
18	5-氟-1H-吲哚-2-甲酰肼	3.524	$[M+Na]^+$	$C_9H_8FN_3O$	1.70	0.049
19	1-(2-呋喃甲基)-5-氧代-3-吡咯烷羧酸	3.548	$[M+H]^+$	$C_{10}H_{11}NO_4$	1.78	0.022
20	4-(吗啉磺酰基)苯胺	3.597	$[M+H]^+$	$C_{10}H_{14}N_2O_3S$	1.90	0.016
21	3-甲基硫噁唑酸	3.6	$[M+NH_4]^+$	$C_{10}H_{11}NO_3$	1.80	0.020
22	假翅果酸	3.603	$[M+H]^+$	$C_{20}H_{22}O_5$	1.74	0.046
23	12-羟基茉莉酸	3.666	$[M+H]^+$	$C_{12}H_{18}O_4$	1.78	0.039
24	8-甲基-7-氧代-5-(2-噻吩基)-7,8-二氢[1,2,4]三唑并[4,3-a]嘧啶-6-甲腈	3.681	$[M+NH_4]^+$	$C_{11}H_7N_5OS$	1.87	0.016
25	3-仲丁基六氢吡咯并[1,2-a]吡嗪-1,4-二酮	3.687	$[M+CH_3OH+H]^+$	$C_{11}H_{18}N_2O_2$	1.75	0.037
26	2-乙基-3-羟基-4H-吡喃-4-酮	3.718	$[M+H]^+$	$C_7H_8O_3$	1.70	0.038
27	环(亮氨酰脯氨酰)	3.768	$[M+H]^+$	$C_{11}H_{18}N_2O_2$	1.70	0.044
28	脯氨酸一酪氨酸	3.858	$[M+H-H_2O]^+$	$C_{14}H_{18}N_2O_3$	1.83	0.017
29	5-(4-羟基戊基)-1,3-苯二酚	4.042	$[M+H]^+$	$C_{11}H_{16}O_3$	1.68	0.043
30	二氢柠檬烯酮	4.048	$[M+H]^+$	$C_{13}H_{14}O_6$	1.85	0.012
31	(5xi,9xi)-贝耶尔-15-烯-18-醇	4.068	$[M+H]^+$	$C_{20}H_{32}O$	1.90	0.018
32	1-(4-羟基-3-甲氧基苯基)-2-(1-吡咯烷基)-1-戊酮	4.115	$[M+H]^+$	$C_{16}H_{23}NO_3$	1.95	0.003
33	O-甲基柯氏九里香酚碱	4.169	$[M+H]^+$	$C_{19}H_{19}NO_2$	1.97	0.001
34	(1R,4aR,5S)-5-[(3E)-5-羟基-3-甲基-3-戊烯-1-基]-1,4a-二甲基-6-亚甲基十一氢-1-萘甲醛	4.214	$[M+ACN+H]^+$	$C_{20}H_{32}O_2$	1.73	0.038
35	埃瑞莫派他西诺酮A	4.348	$[M+H]^+$	$C_{13}H_{18}O_2$	1.75	0.031
36	1-2-氨基-1-(4-羟苯基)乙基环己醇	4.356	$[M+H]^+$	$C_{14}H_{21}NO_2$	1.79	0.034
37	2-氨基-3-(4-羟基苯基)丙醛	4.424	$[M+H]^+$	$C_9H_{11}NO_2$	1.81	0.026
38	去甲文拉法辛	4.611	$[M+H]^+$	$C_{16}H_{25}NO_2$	1.95	0.002
39	托哌酮	4.674	$[M+CH_3OH+H]^+$	$C_{16}H_{23}NO$	1.88	0.012
40	邻苯二甲酸单异丁酯	4.789	$[M+H]^+$	$C_{12}H_{14}O_4$	1.80	0.043
41	O-叔丁基-L-酪氨酸	4.902	$[M+H-H_2O]^+$	$C_{13}H_{19}NO_3$	1.76	0.037
42	4-氨基-5-(4-甲氧基苯基)-2-4-二氢-3H-1,2,4-三唑-3-硫酮	4.912	$[M+H]^+$	$C_9H_{10}N_4OS$	1.80	0.019
43	反式异丁香酚乙酸酯	4.941	$[M+ACN+H]^+$	$C_{12}H_{14}O_3$	1.69	0.047
44	3,4,5-三羟基环己-1-烯-1-甲酸甲酯	4.973	$[M+H]^{2+}$	$C_8H_{12}O_5$	1.81	0.048
45	N-甲基磺酰胺	5.031	$[M+CH_3OH+H]^+$	$C_2H_7NO_2S$	1.92	0.005
46	头孢噻肟I	5.052	$[M+H]^+$	$C_{20}H_{31}NO_3$	1.73	0.033
47	2-吡咯烷酮	5.067	$[M+H]^+$	C_4H_7NO	1.70	0.043
48	左旋那维啶	5.263	$[2M+H]^+$	$C_{17}H_{19}NO_3$	1.79	0.024
49	7β-羟基紫檀醇	5.374	$[M+H]^+$	$C_{29}H_{48}O_2$	2.02	0.000
50	N-异丙基环己甲酰胺	5.59	$[M+NH_4]^+$	$C_{10}H_{19}NO$	1.69	0.040
51	烯丙吗啡	5.646	$[M+H]^+$	$C_{19}H_{21}NO_3$	1.70	0.039

续表 2

序号	代谢物名称	保留时间(min)	参考离子	代谢物分子式	VIP	*P*-value
52	N-(9-(3,4-亚甲二氧基苯基)-2,4,8-壬三烯酰基)哌啶	5.703	$[M+Na]^+$	$C_{21}H_{25}NO_3$	1.70	0.046
53	2'-环己基-1'-氧代-1',4'-二氢-2'H-螺[环己烷-1,3'-异喹啉]-4'-羧酸	5.821	$[M+H]^+$	$C_{21}H_{27}NO_3$	1.73	0.038
54	(2E,4E,6E)-11-(1,3-苯并二恶茂-5-基)-N-异丁基-2,4,6-十一碳三烯酰胺	5.848	$[M+H]^+$	$C_{22}H_{29}NO_3$	1.74	0.031
55	磷脂酰胆碱(16:0/18:1(9z))	5.909	$[M+H]^+$	$C_{42}H_{82}NO_8P$	1.77	0.025
56	(+/−)11(12)-二氢乙醇	5.971	$[M+NH_4]^+$	$C_{20}H_{34}O_4$	1.67	0.049
57	(E)-9-(1,3--苯并二恶茂-5-基)-1-哌啶-1-基壬烷-8-烯-1-酮	5.979	$[M+H]^+$	$C_{21}H_{29}NO_3$	1.73	0.042
58	3-(3-氧[1,2,4]三唑并[4,3-a]吡啶-2(3H)-基)丙酸 [4,3-a]吡啶-2(3H)-基)丙酸	6.073	$[2M+H]^{2+}$	$C_9H_9N_3O_3$	1.89	0.018
59	9-羟基-7-(2-羟基丙-2-基)-1,4a-二甲基-1,2,3,4,4a,9,10,10a-八氢菲-1-羧酸-2H-氧杂癸烯-2-酮	6.084	$[M+Na]^+$	$C_{20}H_{28}O_4$	1.70	0.049
60	氯二恶唑	6.113	$[M+H]^+$	$C_{16}H_{27}NO$	1.71	0.040
61	2-氨基十八烷-4-炔-1,3- 二醇	6.139	$[M+H]^+$	$C_{18}H_{35}NO_2$	1.65	0.050
62	1-十六碳酰基-2-十八碳酰基-sn-甘油-3-磷酸胆碱	6.17	$[M+CH_3OH+H]^+$	$C_{42}H_{80}NO_8P$	1.96	0.007
63	巯基丁酮	6.199	$[M+H]^+$	$C_{10}H_{19}N_5O$	1.77	0.026
64	几内亚碱	6.239	$[M+H]^+$	$C_{24}H_{33}NO_3$	1.81	0.023
65	1-油酰基-2-棕榈酰基-sn-甘油-3-磷酸胆碱	6.244	$[M+ACN+H]^+$	$C_{42}H_{82}NO_8P$	1.87	0.013
66	3-甲基胸腺嘧啶	6.255	$[M+H]^+$		1.91	0.011
67	(2E,10E)-11-(1,3--1-(1-哌啶基)-1-(1-苯并二恶茂-5-基)-2,10-十一碳二烯-1-酮	6.264	$[M+H-H_2O]^+$	$C_{23}H_{31}NO_3$	1.75	0.036
68	1-碘丁烷	6.277	$[M+H]^+$	C_4H_9I	1.78	0.021
69	1-十八碳酰基-2-[(9Z,12Z)-十八碳二烯酰基]-sn-甘油-3-磷酸胆碱	6.314	$[M+H]^+$	$C_{44}H_{84}NO_8P$	1.87	0.037
70	1-异丙基-1H-吲哚-3-甲醛	6.482	$[M+2H]^{2+}$	$C_{12}H_{13}NO$	1.98	0.003
71	N-苄基-1-(2-呋喃基)甲胺	6.554	$[M+ACN+H]^{2+}$	$C_{12}H_{13}NO$	1.94	0.003
72	香草醇内酯	7.392	$[M+H]^+$	$C_{12}H_{15}NO_3S$	1.87	0.016
73	2-氨基硫环戊烷	7.394	$[M+H]^+$	C_4H_7NS	1.73	0.036
74	3-磺酸基苯甲酸	0.517	$[M-H]^-$	$C_7H_6O_5S$	1.74	0.020
75	脒基牛磺酸	0.655	$[M-H]^-$	$C_3H_9N_3O_3S$	1.74	0.019
76	3-羧基-2,3-二脱氧-4-O-[(2E)-3-(4-羟基苯基)-2-丙烯酰基]戊二酸	0.766	$[M-H]^-$	$C_{15}H_{14}O_9$	1.68	0.038
77	2-三氟甲基烟酸	1.149	$[M-H]^-$	$C_7H_4F_3NO_2$	1.94	0.000
78	叔丁氧羰酰基6-氨基己酸	1.581	$[M-H]^-$	$C_{11}H_{21}NO_4$	1.86	0.010
79	苯-1,2,4-三醇	1.808	$[M-H]^-$	$C_6H_6O_3$	1.86	0.007
80	2,3-二甲基丁二酸	3.012	$[M-H]^-$	$C_6H_{10}O_4$	1.74	0.037
81	3-[(2,4-二甲氧基苯基)氨基]-3-氧代丙酸	3.033	$[M-H]^-$	$C_{11}H_{13}NO_5$	1.76	0.040
82	6-(3,5-二甲基-1H-吡唑-1-基)-3(2H)-哒嗪酮	3.245	$[M-H]^-$	$C_9H_{10}N_4O$	1.68	0.040
83	甜蜜素	3.33	$[M-H]^-$	$C_6H_{13}NO_3S$	1.79	0.035
84	2'-氟-2',3'-双脱氧腺苷	3.336	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{12}FN_5O_2$	1.92	0.002
85	(S)-3-羟基丁酸乙酯葡萄糖苷	3.387	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{22}O_8$	1.75	0.023
86	4-羧基苯甘氨酸	3.431	$[M-H]^-$	$C_9H_9NO_4$	1.77	0.017
87	2,6-二甲基-5-甲氧羰基-4-(3-硝基苯基)-1,4-二氢吡啶-3-羧酸	3.543	$[M-H]^-$	$C_{16}H_{16}N_2O_6$	1.70	0.045
88	4-((5-(4-硝基苯基)恶唑-2-基)氨基)苯腈	3.584	$[M-H]^-$	$C_{16}H_{10}N_4O_3$	1.65	0.044
89	8-环戊基-1,3-二甲基黄嘌呤	3.631	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{16}N_4O_2$	1.77	0.041
90	N-苯乙酰基天冬氨酸	3.632	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{13}NO_5$	1.76	0.021
91	9-脱氮-9-(3-噻吩基甲基)鸟嘌呤	3.664	$[M-H]^-$	$C_{11}H_{10}N_4OS$	1.76	0.035
92	4-甲基-3,5-二甲基-1H-吡咯-2,4-二甲酸 2-乙基酯	3.673	$[M-H]^-$	$C_{11}H_{15}NO_4$	1.78	0.023
93	N-苯乙酰基谷氨酸	3.706	$[M-H]^-$	$C_{13}H_{15}NO_5$	1.86	0.006
94	辛二酸	3.749	$[M-H]^-$	$C_8H_{14}O_4$	1.90	0.016
95	4-[(4-羟基-2-甲氧基-3,5,6-三甲基苯甲酰基)氧基]-2-甲氧基-3,5,6-三甲基苯甲酸	3.773	$[M-H]^-$	$C_{22}H_{26}O_7$	1.75	0.028
96	2-[(2-甲基苯甲酰基)氨基]乙酸	3.778	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{11}NO_3$	1.80	0.022
97	2-[(1R,2S,6R,7S)-3,5-二氧代-4-氮杂三环[5.2.1.0~2,6~]癸-4-基]丙酸	3.791	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{15}NO_4$	1.65	0.048
98	2-羟基癸二酸	3.793	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{18}O_5$	1.93	0.001
99	(3R)-3-异丙基-6-氧代庚酸	3.801	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{16}O_3$	1.68	0.036
100	卡马替尼	3.809	$[M-H]^-$	$C_{23}H_{17}FN_6O$	1.72	0.039
101	3,10-二羟基癸酸	3.835	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{20}O_4$	1.83	0.017
102	1,6-二苯基-1,3,5-己三烯	3.88	$[M-H]^-$	$C_{18}H_{16}$	1.87	0.020
103	3-羟基十二烷二酸	3.949	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{22}O_5$	1.88	0.018

续表 2

序号	代谢物名称	保留时间(min)	参考离子	代谢物分子式	VIP	*P*-value
104	维利帕尼	3.993	$[M-H]^-$	$C_{13}H_{16}N_4O$	1.87	0.022
105	2,8-二羟基-3,9,10-三甲氧基杂环丁烷	3.995	$[M-H]^-$	$C_{18}H_{18}O_7$	1.67	0.035
106	苦味酸	4.094	$[M-H]^-$	$C_{15}H_{22}O_5$	1.73	0.036
107	(2E,6E,10E)-14-{[2-O-(beta-D-吡喃葡萄糖基)-*β*-D-吡喃葡萄糖基]氧基}-4-羟基-2,6,10,14-四甲基-2,6,10,15-十六碳四烯酸	4.125	$[M-H]^-$	$C_{32}H_{52}O_{14}$	1.72	0.029
108	樟脑酸	4.127	$[M-H]^-$	$C_{10}H_{16}O_4$	1.77	0.046
109	(Z)-3-(2,4,5-三甲氧基苯基)-2-丙烯醛	4.127	$[M-H]^-$	$C_{12}H_{14}O_4$	1.79	0.015
110	牛磺胆硷	4.543	$[M-H]^-$	$C_{26}H_{45}NO_7S$	1.92	0.008
111	5-(4-羧基-3-甲基丁基)-5,6,8a-三甲基-3-氧代-3,4,4a,5,6,7,8,8a-八氢-1-萘甲酸	4.859	$[M-2H]^{2-}$	$C_{20}H_{30}O_5$	1.73	0.027
112	鼠胆酸	4.913	$[M-H]^-$	$C_{24}H_{40}O_5$	1.78	0.030
113	3*α*,7*β*,21chi-三羟基-5*β*-胆烷-24-酸	4.912	$[M-H]^-$	$C_{24}H_{40}O_5$	1.78	0.013
114	双(苄氧基)甲烷	5.208	$[M-H]^-$	$C_{15}H_{16}O_2$	1.78	0.025
115	5b-鲤胆甾醇硫酸盐	5.336	$[M-H]^-$	$C_{27}H_{48}O_8S$	1.82	0.010
116	2-{(2S,3R,4S,5R)-5-[((4-{[苄基(甲基)氨基]甲基}-1H-1,2,3-三唑-1-基)甲基]-3,4-二羟基四氢-2-呋喃基}-1-[4-(2-甲氧基苯基)-1-哌嗪基]乙酮	5.782	$[M-H]^-$	$C_{29}H_{38}N_6O_5$	1.89	0.014
117	1,4-雄烯二酮	6.077	$[M-H]^-$	$C_{19}H_{24}O_2$	1.64	0.041
118	(4-溴-2-甲酰基苯氧基)乙酸	7.774	$[M-H]^-$	$C_9H_7BrO_4$	1.70	0.034
119	2,5-二氯苯甲酸	7.648	$[M-H]^-$	$C_7H_4C_{12}O_2$	1.78	0.016

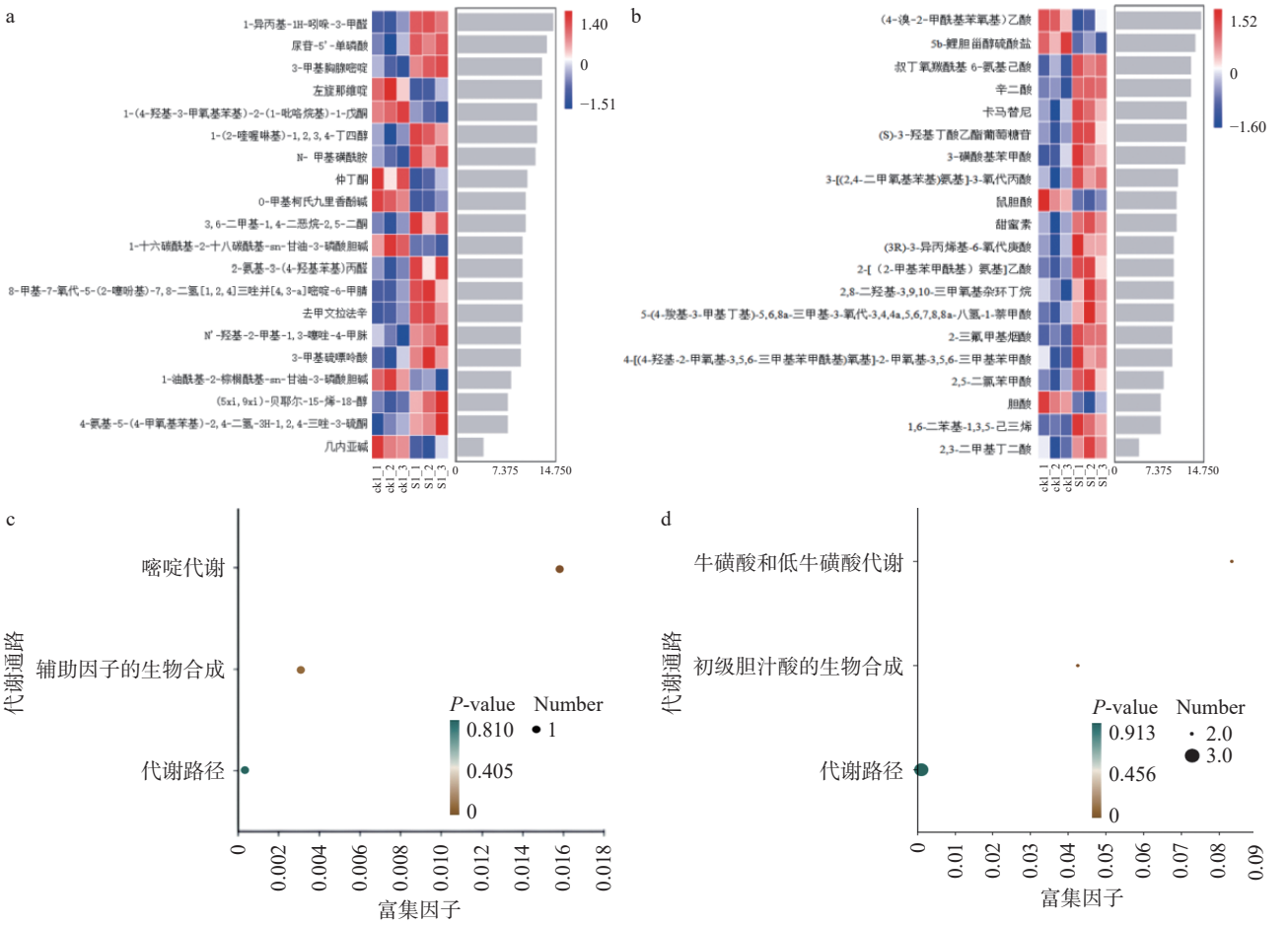


图 4 沙门氏菌污染椒麻鸡样品中潜在代谢物生物标志物的差异分析

Fig.4 Differential analysis of potential metabolite biomarkers in *Salmonella* contaminated pepper chicken samples

注:(a)正离子模式重要性排名前 20 位差异代谢物热图及柱状图,从上到下重要性依次递减;(b)负离子模式重要性排名前 20 位差异代谢物热图及柱状图,从上到下重要性依次递减;(c)正离子模式富集最显著的前 20 条 KEGG pathway 差异物质富集分析;(d)负离子模式富集最显著的前 20 条 KEGG pathway 差异物质富集分析。

随机化,以达到很高的预测准确度[21]。随机森林模型已被广泛用于分析复杂的代谢组学数据[22−25],具有独特的优势。首先,它对异常值和噪声具有相对的稳定性;其次,它能对内部误差、交互作用和变量重要性

进行有用的估计；最后，其预测精度高[26]。通过对比对照组与污染组的变化情况，采用随机森林回归法确定了各 20 种代谢物与污染沙门氏菌相关的潜在代谢标志物（图 4a 和图 4b），可认为这些重要性靠前的代谢物是组间差异的潜在标志代谢物。

2.6　差异物质富集分析

如图 4c 所示，正离子模式下 73 个差异物质在 2 个代谢通路中显著富集，包括嘧啶代谢和辅助因子的生物合成；如图 4d 所示，负离子模式下 46 种差异物质在 2 个代谢通路中显著富集，分别是牛磺酸和亚牛磺酸代谢、初级胆汁酸的生物合成。据报道，氨基酸代谢涉及鸡肉腐败，而嘌呤代谢在生肉和肉类降解过程中发挥着重要作用[27]，可以推断，这四种代谢途径与受沙门氏菌污染的椒麻鸡关系较为密切；污染组中富含的尿苷-5'-单磷酸、脒基牛磺酸、牛磺胆酸、5b-鲤胆甾醇硫酸盐可能是沙门氏菌污染的椒麻鸡的重要代谢物。

2.7　代谢物生物标记物的评估

为了更好地评估沙门氏菌污染组和对照组之间代谢物显著差异的代谢模式，用热图展示差异显著代谢物[28]。如图 5a 和图 5b 所示，4 个代谢物生物标志物在受沙门氏菌污染的样本和对照样本之间显示出不同的模式。结果表明，在污染组中脒基牛磺酸、牛磺胆酸、5b-鲤胆甾醇硫酸盐的含量明显低于空白对照组呈显著下调（P<0.05）趋势，是为了满足细菌的生长速度而消耗的底物[29]；尿苷-5'-单磷酸显著上调（P<0.05），可能是因为沙门氏菌能够在宿主细胞中诱导细胞死亡发生不同程度的磷酸化[30]；Chen 等[31]利用 UPLC-Q-Orbitrap MS（Ultra-performance liquid chromatography-quadrupole-orbitrap mass spectrometry，UPLC-Q-Orbitrap MS）非靶向代谢组学定量分析了受肠炎沙门氏菌污染的鸡肉和新鲜鸡肉样品中的候选代谢物生物标记物，确认了乙酰胆碱、L-蛋氨酸、L-脯氨酸、L-缬氨酸和 L-正亮氨酸被确定为肠炎沙门氏菌污染鸡肉的生物标记物。对这五种生物标记物的综合接收器工作特征曲线分析的 AUC 值为 0.956，表明它们在预测生鸡肉中的肠炎沙门氏菌污染方面具有很高的灵敏度和特异性。Xu 等[13]研究发现，鼠伤寒沙门氏菌污染猪肉后，缬氨酸、色氨酸、天冬氨酸、赖氨酸和甘氨酸等代谢物的丰度均呈现上升趋势。陈兰[11]采用基于 UHPLC-QTRAP-MS-（Ultra-high performance liquid chromatography-quadrupole linear ion trap mass spectrometry，UHPLC-QTRAP-MS）的靶向代谢组学方法，成功鉴定了蚁酸、1-焦谷氨酸、5-羟基赖氨酸、n,n-二甲基精氨酸、4-羟基苯甲酸和甲萘醌为受沙门氏菌污染鸡肉的代谢物生物标记物。在损失的代谢物中，肌苷-5′-单磷酸、鸟苷酸、葡萄糖酸和 D-葡萄糖-6-磷酸与肉类腐败有关，肌苷-5'-单磷酸和鸟苷酸是核苷酸的降解产物，已成为衡量肉类新鲜度的重要指标[10]。

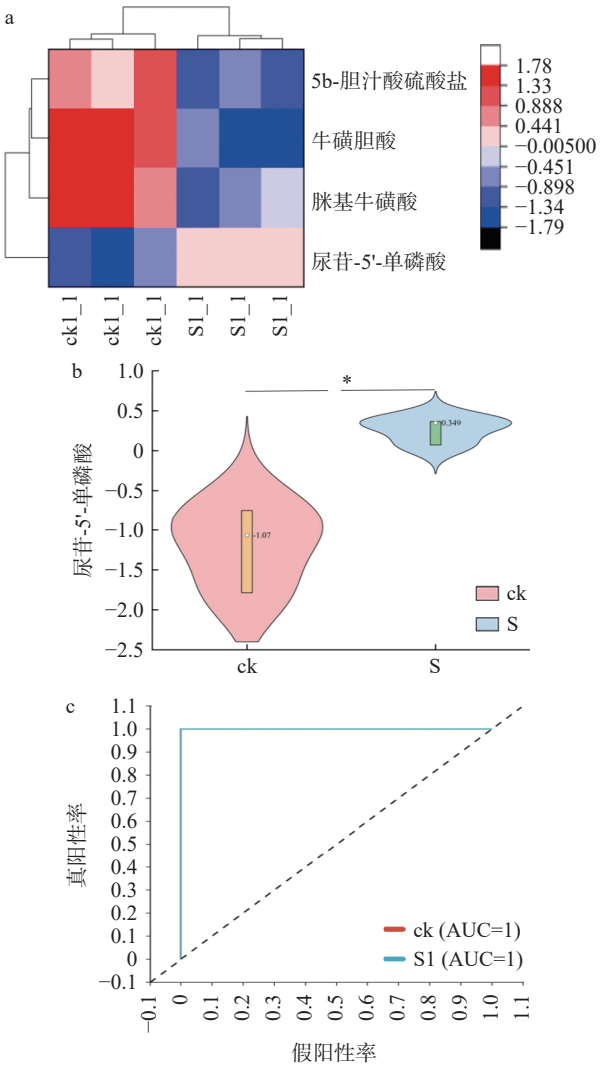


图 5　沙门氏菌污染椒麻鸡样品中潜在代谢物生物标志物的稳定性评估

Fig.5　Stability assessment of potential metabolite biomarkers in *Salmonella*-contaminated pepper chicken samples

注：（a）潜在代谢物生物标志物的聚类热图；（b）潜在代谢物生物标记物的小提琴图；（c）进行 10 倍交叉验证构建综合 ROC 曲线；*表示 P<0.05。

众所周知，氨基酸、核苷酸和脂肪酸代谢物含量的变化直接反映了鲜肉的生理和生化反应[29]；本研究确定的代谢物与其他学者的研究不同，可能与鸡的品种、饲养条件及加工过程不同有关。

ROC 曲线分析是一种公认的评估标记物性能的方法[32]，AUC 值大于 0.9 表示预测能力极强，AUC 值小于 0.5 表示预测能力不足[33]。利用 ROC 曲线分析来评估标志代谢物预测椒麻鸡中沙门氏菌污染的能力。结果表明，4 个代谢物生物标志物的联合 ROC 分析的 AUC 值为 1.00（图 5c），尿苷-5'-单磷酸对识别受沙门氏菌污染的椒麻鸡样本具有很好的预测能力，可作为沙门氏菌污染椒麻鸡的代谢物生物标记物。

3　结论

本研究采用 LC-MS 非靶向代谢组学方法，成功鉴定了沙门氏菌污染组和对照组之间的共 119 个差

异代谢物，通过 OPLS-DA 分析、随机森林分析、差异物质富集分析和 ROC 曲线分析，发现脒基牛磺酸、牛磺胆酸、5b-鲤胆甾醇硫酸盐的含量显著下调（$P<0.05$），尿苷-5'-单磷酸含量显著上调（$P<0.05$）。本研究结果表明，尿苷-5'-单磷酸被鉴定为受沙门氏菌污染椒麻鸡的标志代谢物，为开发一种快速、有效和定量的方法来控制肉制品中的沙门氏菌污染提供了宝贵的信息。后续研究还需扩大样本多样性，结合多组学技术揭示其调控机制，验证优化检测方法的实用性，构建更可靠的沙门氏菌污染预测模型，从而增强研究的科学深度与应用价值。

© The Author(s) 2026. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参考文献

[1] SOMJID P, PANPIPAT W, CHEONG L Z, et al. Reduced washing cycle for sustainable mackerel (*Rastrelliger kanagurta*) surimi production: evaluation of bio-physico-chemical, rheological, and gel-forming properties[J]. Foods, 2021, 10(11): 2717−2735.

[2] CASTRO-VARGAS, RAFAEL E, et al. Antibiotic resistance in *Salmonella* spp. isolated from poultry: A global overview[J]. Veterinary World, 2020, 13(10): 2070−2084.

[3] CARRATURO F, LIBRALATO G, ESPOSITO R, et al. Metabolomic profiling of food matrices: preliminary identification of potential markers of microbial contamination[J]. Journal of Food Science, 2020, 85(10): 3467−3477.

[4] KAMARUDIN A N, COX T, KOLAMUNNAGE-DONA R. Time-dependent ROC curve analysis in medical research: current methods and applications[J]. BMC Medical Research Methodology, 2017, 17(1): 1−19.

[5] MA S, KIM A, LEE W, et al. Vibrio harveyi infection significantly alters amino acid and carbohydrate metabolism in whiteleg shrimp, litopenaeus vannamei[J]. Metabolites, 2020, 10(6): 265−280.

[6] JOHNSON C H, IVANISEVIC J, SIUZDAK G. Metabolomics: beyond biomarkers and towards mechanisms[J]. Nature Reviews Molecular Cell Biology, 2016, 17(7): 451.

[7] LECHTENFELD O J, HERTKOM N, SHEN Y, et al. Marine sequestration of carbon in bacterial metabolites[J]. Nature Communications, 2015, 6(1): 6711−6719.

[8] PINU F R, BEALE D J, PATEN A M, et al. Systems biology and multi-omics integration: viewpoints from the metabolomics research community[J]. Metabolites, 2019, 9(4): 76−107.

[9] SLOWINSKA M, SALLEM H, CLENCH M R, et al. Metabolomic analysis of white and yellow seminal plasma in turkeys meleagris gallopavo[J]. Poultry Science, 2018, 97(3): 1059−1065.

[10] WEN Dongling, LIU Yue, YU Qian. Metabolomic approach to measuring quality of chilled chicken meat during storage[J]. Poultry Science. 2020, 99(5): 2543–2554.

[11] 陈兰. 鸡肉中三种食源性致病菌的代谢标志物筛选、鉴定及其快速检测方法研究[D]. 扬州：扬州大学, 2024. [CHEN L. Screening and identification of metabolic markers of three foodborne pathogens in chicken meat and their rapid detection methods [D]. Yangzhou: Yangzhou University, 2024.]

[12] JADHAV S R, SHAH R M, KARPE A V, et al. Identification of putative biomarkers specific to foodborne pathogens using metabolomics: methods and protocols[J]. Methods in Molecular Biology, 2019, 19(18): 149−164.

[13] XU Y, CHEUNG W, WINDER C L, et al. Metabolic profiling of meat: assessment of pork hygiene and contamination with *Salmonella* typhimurium[J]. The Analyst, 2011, 136(3): 508−514.

[14] CHEN L, ZHANG T, DING H, et al. Identification of metabolite biomarkers in *Salmonella* enteritidis-contaminated chickens using UHPLC-QTRAP-MS-based targeted metabolomics[J]. Food Chemistry: X, 2023, 20: 100966.

[15] ZHANG T, ZHANG S, CHEN L, et al. UHPLC-MS/MS-based nontargeted metabolomics analysis reveals biomarkers related to the freshness of chilled chicken[J]. Foods, 2020, 9(9): 1326−1342.

[16] JOHNSON A E, SIDICK K L, PIRGOZLIE V R, et al. Metabonomic profiling of chicken eggs during storage using high-performance liquid chromatography–quadrupole time-of-flight mass spectrometry[J]. Analytical Chemistry, 2018, 90(12): 7489−7494.

[17] CHANG W C W, WU H Y, KAN H L, et al. Discovery of spoilage markers for chicken eggs using liquid chromatography-high resolution mass spectrometry-based untargeted and targeted foodomics[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2021, 69(14): 4331−4341.

[18] ZHOU L, CAI Y, YANG L, et al. Comparative metabolomics analysis of stigmas and petals in Chinese saffron (*Crocus sativus*) by widely targeted metabolomics[J]. Plants, 2022, 11(18): 2427.

[19] CHOI Y J, LEE S Y. Microbial production of short-chain alkanes[J]. Nature, 2013, 502(7472): 571−574.

[20] 平洪睿, 王亚萍, 陈佳妮, 等. 贵州苗族、水族红酸汤滋味与香气差异分析[J]. 食品工业科技, 2024, 45(8): 1−19. [PING H R, WANG Y P, CHEN J N, et al. Analysis of taste and aroma differences between miao and shui ethnic red sour soup in Guizhou[J]. Science and Technology of Food Industry, 2024, 45(8): 1−19.]

[21] RIGATTI S J. Random forest[J]. Journal of Insurance Medicine, 2017, 47(1): 31−39.

[22] EDELENYI F S D, GOUMIDI L, BERTRAIS S, et al. Prediction of the metabolic syndrome status based on dietary and genetic parameters, using random forest[J]. Genes & Nutrition, 2008, 3(3−4): 173−176.

[23] FATHI F, MAJAKI-KASMAEE L, MANI-VARNOSFADERANI A, et al. 1H NMR based metabolic profiling in crohn's disease by random forest methodology[J]. Magnetic Resonance in Chemistry, 2014, 52(7): 370−376.

[24] SHOOMBUATONG W, PRACHAYASITTIKUL V, ANUWONGCHAROEN N, et al. Navigating the chemical space of dipeptidyl peptidase 4 inhibitors[J]. Drug Design, Development and Therapy, 2015, 9(1): 4515−4549.

[25] OZA V, AICHER J, REED L. Random forest analysis of untargeted metabolomics data suggests increased use of omega fatty acid oxidation pathway in drosophila melanogaster larvae fed a medium chain fatty acid rich high-fat diet[J]. Metabolites, 2018, 9(1): 5−20.

[26] ZHANG L, CARLOS M. VICENTE G, DAI L, et al. Exploring metabolic syndrome serum profiling based on gas chromatography mass spectrometry and random forest models[J]. Analytica Chimica Acta, 2014, 827(7): 22−27.

[27] DARIO P, GASTONNOEL R, SEBASTIANALICIA Z, et al. Development of an electroanalytical method to control quality in fish

samples based on an edge plane pyrolytic graphite electrode. Simultaneous determination of hypoxanthine, xanthine and uric acid[J]. Microchemical Journal, 2018, 138(12): 58−64.

[28] CHEN C Y, ZHENG J W, CHEN Y X, et al. Metabolomics characterize the differential metabolic markers between bama xiang pig and debao pig to identify pork[J]. Foods, 2022, 12(1): 5−18.

[29] HERRANZ B, DE LA HOZ L, HIERRO E, et al. Improvement of the sensory properties of dry-fermented sausages by the addition of free amino acids[J]. Food Chemistry, 2005, 91(4): 673−682.

[30] PERRY F, JOHNSON C, AYLWARD B, et al. The differential phosphorylation-dependent signaling and glucose immunometabolic responses induced during infection by *Salmonella* enteritidis and salmonella heidelberg in chicken macrophage-like cells[J]. Microorganisms, 2020, 8(7): 1041−1061.

[31] CHEN L, DING H, ZHU Y, et al. Untargeted and targeted metabolomics identify metabolite biomarkers for *Salmonella* enteritidis in chicken meat[J]. Food Chemistry, 2023, 409: 135294.

[32] JUNGE M R J, DETTORI J R. ROC Solid: Receiver operator characteristic (ROC) curves as a foundation for better diagnostic tests[J]. Global Spine Journal, 2018, 8(4): 424−429.

[33] FU L, PENG Q. A deep ensemble model to predict miRNA-disease association[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 14482.