# 代谢组学技术在食品安全中的应用

刘思洁1, 吴永宁2\*, 方赤光1

(1. 吉林省疾病预防控制中心, 长春 130062; 2. 国家食品安全风险评估中心, 北京 100021)

摘 要: 随着我国经济和社会的持续较高速度发展以及人民生活水平的提高,对食品安全提出了越来越高的要求。近年来,我国出现了许多令人忧虑的食品安全问题,食品安全风险监测工作正面临着巨大的挑战。代谢组学是通过考察生物体系受刺激或扰动后,代谢产物的变化或其随时间的变化的一个新兴的重要组学技术,在药物研究、疾病诊断、植物育种、环境科学等很多领域中得以广泛应用。本文在介绍了目前我国食品安全监测中存在的问题之后,对代谢组学技术在食品安全领域中的应用研究进行了全面的综述,表明了代谢组学技术在食品中兽药残留、禁用物质、转基因食品、食品掺假和食源性疾病等检测方面有着良好的应用前景,但在实际应用中依然存在一些问题有待进一步研究,为应用代谢组学开展食品安全风险监测与评估提供一定的参考。

关键词: 代谢组学; 食品安全; 兽药残留; 禁用物质; 转基因食品; 掺假食品; 食源性疾病

# Review on the application of metabonomics approach in food safety

LIU Si-Jie<sup>1</sup>, WU Yong-Ning<sup>2\*</sup>, FANG Chi-Guang<sup>1</sup>

(1. Jilin Provincial Center for Disease Prevention and Control, Changchun 130062, China; 2. China National Center for Food Safety Risk Assessment, Beijing 100021, China)

**ABSTRACT:** The quality and safety of food is a major benchmark of the economic development and people's living conditions of a country. In recent years, several cases of the food scandal have been disclosed on various media. Food safety risk monitoring work is facing the huge challenge. Metabonomics mainly investigates the change of endogenous metabolism of biological system that is stimulated or disturbed, and studies the metabolic pathways of biological system. Metabonomics is an emerged important research tool of system biology in drug discovery, disease diagnosis, plant breeding and environmental science. In this review, we gave an overview of some food safety problems that have had a major impact on public health over the last several years in China and how metabonomics can be used to tackle the issue of food safety. The review showed that metabonomics had favorable the applying prospects in residues of veterinary drugs, banned substances, genetically modified food, food adulteration, foodborne illnesses. However, there were some problems in the practical application, which needed to be further in-depth study. This review may be valuable for the further study.

**KEY WORDS:** metabonomics; food safety; residues of veterinary drugs; banned substances; genetically modified food; food adulteration; foodborne illnesses

基金项目: 国家留学基金委资助项目(2011822166)

Fund: Supported by the China Scholarship Council (2011822166)

<sup>\*</sup>通讯作者:吴永宁,博士,研究员,主要从事食品安全风险监测与评估。E-mail: wuyongning@cfsa.net.cn

<sup>\*</sup>Corresponding author: WU Yong-Ning, professor, China National Center for Food Safety Risk Assessment, No.7, Panjiayuannanli, Chaoyang District, Beijing 100021, China. E-mail: wuyongning@cfsa.net.cn

# 1 引言

食品安全是保护人类健康、提高人类生活质量 的基础。目前,食品安全已成为全球性的重大战略性 问题, 并越来越受到世界各国政府和消费者的高度 重视。随着我国经济和社会的持续较高速度发展以及 人民生活水平的提高, 对食品安全问题提出了越来 越高的要求。中国食品安全水平不断提高,但是当前 我国食品安全形势依然很严峻。近年来、我国出现了 许多令人忧虑的食品安全问题, 如苏丹红鸭蛋、孔雀 绿鱼虾、三聚氰胺奶粉及牛奶、瘦肉精、地沟油、台 湾塑化剂有毒食品、爆炸西瓜、染色馒头事件等等, 这不仅严重影响了人民的身体健康, 造成了巨额的 财产损失,而且也影响到了中国的经济发展、食品 出口、社会稳定等一系列问题。食品安全风险监测 工作正面临着巨大的挑战。在常规的食品分析中, 常用色谱仪、光谱仪、质谱仪和其他一些仪器设备 对已知目标化合物进行检测、可以起到很好的检测 效果[1]、但是由于不法商贩制作假冒伪劣食品时所 使用的原料都是国家明文规定禁止在食品中使用的 化学品,并没有相应的食品检验标准,常规的检测 方法往往很难检测出上述问题食品。因此、目前亟需 一种新的检测分析技术来解决食品检验问题。

代谢组学是通过考察生物体系受刺激或扰动后, 相对分子量小于 1000 的小分子代谢产物的变化或其 随时间的变化[2]。1999年由英国伦敦大学帝国学院的 Jeremy Nicholson 教授首次提出代谢组学一词, 它与 基因组学、蛋白质组学、转录组学共同构成了"系统 生物学"[3]。根据研究对象和目的的不同,代谢组学分 析技术分为靶向代谢组学和非靶向代谢组学技术, 即可以对已知的化学物质进行分析、又能对未知的 化学物质进行分析[4-6]、因此代谢组学技术作为一个 新兴的重要研究技术, 在药物研究、疾病诊断、植物 育种、环境科学等领域广泛应用[7-15],并取得了很大 的成绩、显示了良好的应用前景。代谢组学基于全面 分析食品成分组成的整体分析方法、因此在检测非 特定目标物方面有其他检验方法所没有的优势,因此 近几年, 国内外一些学者陆续采用代谢组学技术对 食品安全领域中存在的问题进行了研究[16-19]。本文针 对代谢组学技术在食品安全领域的应用进行了综述、 为进一步应用代谢组学开展食品安全风险监测与评 估提供一定的参考。

在此综述中,我们利用美国医学文献数据库 (Medline),使用"食品安全"(food safety)、"食品代谢组学"(food metabonomics)和"发表日期"(date-publication)三个关键词进行检索,在 2001年~2012年期间共检索出 47 篇与食品安全代谢组学相关的文献,这些文献主要关注食品中兽药残留、禁用物质、转基因食品、食品掺假和食源性疾病等食品安全问题。

## 2 代谢组学技术在兽药残留检测中的应用

随着人们生活水平的日益提高、对动物源食品 已由需求型转为质量型的要求、动物源食品中的兽 药残留已逐渐成为食品安全关注的一个焦点。一些不 法商贩明知道"瘦肉精"对人体健康有危害、但为了 攫取暴利仍然大量非法生产、销售并使用"瘦肉精", 将其添加到饲料中、增加瘦肉率、但如果作为饲料添 加剂, 使用剂量是人用药剂量的 10 倍以上, 才能达 到提高瘦肉率的效果。它用量大、使用的时间长、代 谢慢、所以在屠宰前到上市、在猪体内的残留量都很 大。这个残留量通过食物进入人体、就使人体渐渐地 中毒,积蓄中毒。世界各国,特别是西方发达国家都 加强了对国际贸易动物性食品中兽药残留的检测。我 国国家食品安全风险监测计划从 2009 年开始检测两 种 β2-受体激动剂到 2012 年增加到 9 种, 监测项目逐 年递增的原因是由于一些不法商贩正在使用更多的  $\beta_2$ -受体激动剂,今后对  $\beta_2$ -受体激动剂的检测组分会 不断增加。除了建立多组分的 β2-受体激动剂检测技 术外,可利用代谢组学技术来发现这一类兽药的生 物标志物、进而可以有效监测到非法使用此类兽药 的情况。Courant 等[20]利用液相色谱-高分辨质谱仪 (LC-HRMS),结合非靶向代谢组学分析方法,建立 了根据小牛尿液代谢物的改变来监测滥用 β2-受体激 动剂克伦特罗的方法,结合主成分分析(PCA)和正交 偏最小二乘法判别分析(OPLS-DA)进行数据分析、 发现了两个潜在的生物标志物、但能否作为克伦特 罗所特有的生物标志物还有待进一步确证。

Regal 等 [21] 利用液相色谱-高分辨质谱仪 (LC-LTQ-Orbitrap),应用代谢组学的方法建立了两个模型,对牛的血清进行分析以鉴定牛是否使用了雌二醇或孕酮。实验结果发现了雌二醇或孕酮的潜在生物标志物,为准确判断牛体内是否含有雌二醇或孕酮提供了理论依据。

由此可见,代谢组学可以建立生物标志物与违禁添加的一组兽药之间的量效关系,从而可作为一个指示物为相关预警监督提供一个预知平台。

## 3 代谢组学技术在禁用物质检测中的应用

我国卫生部自 2008 年以来陆续发布了五批《食品 中可能违法添加的非食用物质和易滥用的食品添加 剂名单》, 但是使用禁用物质添加到食品中的事件还 是屡禁不止。2008 年我国出现了奶粉中添加三聚氰 胺事件后, 有很多文献报道了对三聚氰胺的检测及 对人体肾脏毒性的影响<sup>[22]</sup>。Duan 等<sup>[23]</sup>运用代谢组学 方法研究了由三聚氰胺诱发导致儿童肾结石的生物 标志物,利用超高效液相色谱飞行时间质谱仪 (UPLC-QTOF), 结合主成分分析和正交偏最小二乘 法判别分析进行数据分析, 通过对由三聚氰胺导致 肾结石的儿童和健康儿童的尿液研究、发现了三聚 **氰胺导致代谢异常的生物标记物次黄嘌呤、为今后** 进一步研究三聚氰胺对机体的影响提供了理论依据。 Xie 等<sup>[24]</sup>则建立了相应的动物模型、发现三聚氰胺摄 入量的不同对肾脏的毒性也不同; 当三聚氰胺和三 聚氰酸 1:1 混合时的毒性与摄入 600 mg 三聚氰胺引 起的肾脏毒性是一样的,也会引起肾结石,同时研究 表明柠檬酸可以作为其生物标志物。Schnackenberg 等[25]则认为羟脯氨酸是三聚氰胺和三聚氰酸的生物 标志物。无论他们的结论如何都表明代谢组学方法可 以用来监控三聚氰胺的使用以及三聚氰胺导致肾脏 损伤的无创检测。

### 4 代谢组学技术在转基因食品检测中的应用

转基因作为一种新兴的生物技术手段,它的不成熟和不确定性,使得转基因食品的安全性成为人们关注的焦点。1993 年,国际经合组织(OECD)首次提出了转基因食品的评价原则——"实质等同"的原则<sup>[26]</sup>。目前国际上已有不少对转基因食品的评估研究<sup>[27,28]</sup>。转基因食品与传统食品之间的差异同样也可以通过代谢组学技术加以区分,如 Catchpole 等<sup>[29]</sup>对转基因土豆和非转基因土豆用聚类分析方法进行比较,发现转基因土豆和非转基因土豆除了在果聚糖及其衍生物上有一些差异外,其他代谢指纹和代谢轮廓差异并不大,研究进一步表明不同栽培系之间的转基因土豆的代谢轮廓有显著差异。Kim 等<sup>[30]</sup>也

用傅立叶红外光谱仪和核磁共振仪器,结合代谢指纹谱和多变量统计分析技术对非转基因土豆和转基因土豆进行了分析。分析结果表明,非转基因土豆和转基因土豆代谢组学分析结果虽然存在一定的差别,但这种差异没有非转基因土豆储存一周后的代谢差异显著。这些研究都提示在做转基因食品代谢组学时要充分考虑环境、时间等因素的影响。

代谢组学技术也已应用到对转基因大米<sup>[31,32]</sup>、转基因玉米<sup>[33]</sup>、转基因番茄<sup>[34]</sup>等转基因食品的分析。这些研究主要集中在转基因食品和非转基因食品之间的代谢差异及是否存在非预期的代谢反应。研究表明代谢组学技术可以快速、准确、简便地评估转基因食品与非转基因食品之间的代谢差异,从而检测是否对人类健康造成影响。

### 5 代谢组学技术在食品掺假检测中的应用

为降低成本,一些食品制造商减少主料,以次充好,严重危害消费者利益。常规的食品分析检测只检测目标化合物,往往不能检出这些掺假食品。代谢组学技术侧重于食品所有成分组成的整体定性定量分析,因此可以对掺假食品进行科学的分析鉴别。研究表明,很多掺假食品可以通过代谢组学技术进行鉴别[35-38]。

根据英国肉类制造商协会和欧盟的规定, 机械 回收肉是不属于肉的范畴、但一些不法商贩仍用其 充当人工剔骨肉以谋取暴利。Surowiec 等[39]通过代 谢组学技术、利用气相色谱质谱联用仪成功地区分 出机械回收肉(mechanically recovered meat)和人工剔 骨肉(hand-deboned meat), 为防止机械回收肉以次充 好提供了检测依据。Goodacre 等[40]利用电喷雾电离 质谱结合主成分分析技术和偏最小二乘法统计模型 对橄榄油中掺入蔬菜油和花生油进行鉴别。所建立的 模型能够很好的对橄榄油是否添加了蔬菜油和花生 油做出快速的判断、具有一定的实际应用价值。Son 等[41]采用代谢组学技术、利用氢谱核磁共振仪、结 合主成分分析和正交偏最小二乘法判别分析对不同 地域、不同品种的葡萄如早期坎贝尔、赤霞珠、穗乐 仙所酿制的葡萄酒进行了鉴别,研究结果表明不同 品种、不同区域的葡萄的化学成分是有明显区别的, 主要表现为2,3-丁二醇、乳酸、乙酸、脯氨酸、琥珀 酸、苹果酸、甘油、酒石酸、葡萄糖、酚类等化学成 分的不同、产自加利福尼亚州的赤珠霞中所含的脯

氨酸含量明显高于产自法国和澳大利亚的葡萄酒, 因此可以通过对葡萄酒化学成分的分析鉴别葡萄酒 的质量和产地。综上所述,当传统的感官指标评价和 常规质量指标的检测不能有效区分掺假和假冒伪劣 食品时,利用代谢组学技术可以非常快速、准确地鉴 定出掺假和假冒伪劣食品,为食品安全风险监测提 供有力的技术支撑。

## 6 代谢组学技术在食源性疾病检测中的应用

食源性疾病,特别是由病原菌导致的微生物性 食物中毒暴发是当今世界上最广泛的卫生问题之一。 传统的食源性致病菌检测过于繁琐,易出现假阳性 或假阴性,因此研制快速、准确、简便的检测方法已 成为食源性疾病研究领域的热点。

目前关于代谢组学在食源性致病菌检测上的研 究多集中在沙门氏菌和大肠杆菌的鉴定[42,43]。Juan 等[44]利用毛细管电泳二极管阵列(CE-PDA)、液相色 谱质谱(HPLC-MS)和气相色谱(GC-MS)三种检测方 法, 结合主成分分析和偏最小二乘法, 对鸡肉和牛肉 中的大肠杆菌 O157:H7 和沙门氏菌进行了检测。通 过对三种检测方法的比较, 最终采用气相色谱质谱 检测的数据进行分析,并成功地预测了未知样品中 有致病菌。但是使用非选择性细菌培养液进行检测后 并没有找到大肠杆菌 O157:H7 和沙门氏菌潜在的生 物标志物。Nakai 等[45]同样对沙门氏菌的检测建立了 方法, 虽然能够区分污染样品和对照样品, 但却无法 确认是何种病菌。由此可见、虽然利用代谢组学技术 对食源性致病菌的检测研究已初见成效,但是用代 谢组学技术对食源性疾病进行定性定量检测方法还 存在一定的局限性、需进一步完善。

#### 7 小 结

代谢组学技术作为继基因组学和蛋白组学之后 新发展的一门学科,在食品安全领域已显示了良好 的应用前景。在我国,基于代谢组学技术的食品安全 领域的研究起步比较晚,相关文章比较少,因此还有 待进一步开发研究,建立相应的分析方法,使之成为 确保食品安全,保障人民身体健康的重要技术支撑。

#### 参考文献

[1] Erik T, Johan R, Karl-Erik HK, et al. A concept study on

- non-targeted screening for chemical contaminants in food using liquid chromatography–mass spectrometry in combination with a metabolomics approach[J]. Anal Bioanal Chem, 2013, 405: 1237–1243.
- [2] Lao YM, Jiang JG, Lu Y. Application of metabonomic analytical techniques in the modernization and toxicology research of traditional Chin Med[J]. Br J Pharmacol, 2009, 157: 1128–1141.
- [3] Nicholson JK, Wilson ID. Understanding 'global' systems biology: metabonomics and the continuum of metabolism[J]. Nat Rev, 2003, 2: 668–676.
- [4] Juan MCC, Jose' IRDC, Edgardo E, et al. Metabolomic analysis in food science: a review[J]. Trends in Food Sci Technol, 2009, 20: 557–566.
- [5] Rochfort S. Metabolomics reviewed: A new "Omics" platform technology for systems biology and implications for natural products research[J]. J Nat Prod, 2005, 68: 1813–1820.
- [6] Lindon JC, Holmes E, Bollard MB, et al. Metabonomics technologies and their applications in physiological monitoring, drug safety assessment and disease diagnosis[J]. Biomarkers, 2004, 9: 1–31.
- [7] Hall RD, Brouwer ID, Fitzgerald MA. Plant metabolomics and its potential application for human nutrition[J]. Physiol Plant, 2008, 132 (2): 162–175.
- [8] Wishart DS. Applications of metabolomics in drug discovery and development[J]. Drugs R D, 2008, 9 (5): 307–322.
- [9] Kaddurah DR, Krishnan KR. Metabolomics: a global biochemical approach to the study of central nervous system diseases[J]. Neuropsychopharmacol, 2009, 34 (1): 173–186.
- [10] 俞颖,曹毅,陈益民,等.基于液相色谱-质谱联用系统的系统性红斑狼疮患者血浆代谢组学分析[J].色谱,2010,28:644-648.
  - Yu Y, Cao Y, Chen YM, *et al.* Plasmametabonom ics study of systemic lupus erythematosus based on liquid chromatographymass spectrometry[J]. Chin J Chromatogr, 2010, 28: 644–648.
- [11] 谷金宁, 牛俊, 皮子风, 等. 尿液代谢组学方法研究人参总皂 苷治疗糖尿病心肌病大鼠作用机制[J]. 分析化学, 41(3): 371-376.
  - Gu JN, Niu J, Pi ZF, *et al.* A urinary metabonomics research on total G insensoide treated diabetes cardiomyopathy rats based on rapid resolution liquid chromatography mass spectrometry[J]. Chin J Anal Chem, 41(3): 371–376.
- [12] 周红光, 陈海彬, 王瑞平, 等. 代谢组学在中药复方研究中的应用[J]. 中国药理学通报, 2013, 29(2): 161–164.

  Zhou HG, Chen HB, Wang RP, et al. Metabonomics and its application in TCM formula[J]. Chin Phar Bull, 2013, 29(2): 161–164.

- [13] 张凤霞, 王国栋. 植物代谢组学应用研究-现状与展望[J]. 中国农业科技导报, 2013, 15(2): 28-32.
  - Zhang FX, Wang GD. The applications of metabolomics in plant biology-current status and prospective[J]. J Agric Sci Tech, 2013, 15(2): 28–32.
- [14] 王伟华, 韩占江. 新疆慕萨莱思酒天然活性成分的代谢组学研究进展-以原花青素为例[J]. 食品安全质量检测学报, 2013, 4(6): 1803–1807.
  - Wang WH, Han ZJ. Research progress on metabonomics method of natural active ingredients in Musalais wine in Xinjiang—taking procyanidins for example[J]. J Food Saf Qual, 2013, 4(6): 1803–1807.
- [15] 史怀, 刘波, 陈峥, 等. 基于 LC/Q-TOF MS 的芽胞杆菌代谢 组学分析方法[J]. 福建农业学报, 2012, 7(10):1112-1119. Shi H, liu B, Chen Z, et al. Metabonomics analysis of bacillus based on LC/Q-TOF MS[J]. Fujian J Agric Sci, 2012, 7(10): 1112-1119.
- [16] 邱绪建, 耿伟, 刘光明, 等. 代谢组学方法在食品安全中的应用研究进展[J]. 食品工业科技, 2012, 33(21): 369-373.

  Qiu XJ, Geng W, Liu GM, *et al.* A review on the application of metabolomics method in food[J]. Sci Tech Food Ind, 2012, 33(21): 369-373.
- [17] 王世成,王颜红,胡小燕,等.代谢组学技术以及在食品安全方面的应用[J]. 食品科技,2009,34(3):122-125.
  Wang SC, Wang YH, Hu XY, et al. Metabonomics technology and its application in food safety[J]. Food Sci Tech, 2009, 34(3): 122-125.
- [18] 钟凯, 吴永宁. 代谢组学在食品安全与营养学中的应用[J]. 国外医学卫生学分册, 2009, 36(2): 93-97.

  Zhong K, Wu YN. Application of metabonomics in the food
  - Zhong K, Wu YN. Application of metabonomics in the food safety and nutrition[J]. Fore med sci(hyg), 2009, 36(2): 93–97.
- [19] 陈利利, 李云志, 李丽. 代谢组学技术及其在食品鉴别中的应用[J]. 食品工业科技, 2011, 32(12): 585-589.

  Chen LL, Li YZ, Li L. Metabolomics technology and its application in food identification[J]. Sci Tech Food Ind, 2011, 32(12): 585-589.
- [20] Courant F, Pinel G, Bichon E, et al. Development of a metabolomic approach based on liquid chromatographyhigh resolution mass spectrometry to screen for clenbuterol abuse in calves[J]. Analyst, 2009, 134: 1637–1646.
- [21] Regal P, Anizan S, Antignac JP, et al. Metabolomic approach based on liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry to screen for the illegal use of estradiol and progesterone in cattle[J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 700: 16–25.
- [22] Wu YN, Zhang Y. Analytical chemistry, toxicology, epidemiology and health impact assessment of melamine in infant formula:

- Recent progress and developments[J]. Food Chem Toxicol, 2013, 56: 325–335.
- [23] Duan HJ, Guan N, Wu YN, et al. Identification of biomarkers for melamine-induced nephrolithiasis in young children based on ultra high performance liquid chromatography coupled to time-of-flight mass spectrometry (U-HPLC-Q-TOF/MS)[J]. J Chromatogr B, 2011, 879:3544–3550.
- [24] Xie GX, Zheng XJ, Qi X, et al. Metabonomic evaluation of melamine-induced acute renal toxicity in rats[J]. J Prot Rese. 2010, 9: 125–133
- [25] Schnackenberg LK, Sun JC, Pence LM, et al. Metabolomics evaluation of droxyproline as a potential marker of melamine and cyanuric acid nephrotoxicity in male and female Fischer F344 rats[J]. Food Chem Toxicol, 2012, 50: 3978–3983.
- [26] 王正鹏, 张树珍. 转基因动物食品的安全性[J]. 安徽农业科学, 2007, 35(19): 5868-5869.
   Wang ZP, Zhang SZ. The safety issue brought by transgenic animal food[J]. J Anhui Agri Sci, 2007, 35(19): 5868-5869.
- [27] Zdunczyk Z. New bioanalytical technologies ("Omics") in the evaluation of biological properties of foods and feeds[J]. Polish J Nat Sci Suppl, 2006, 3: 33–38.
- [28] Chao E, Krewski D. A risk-based classification scheme for genetically modified foods II: graded testing[J]. Regul Toxicol Pharmacol, 2008, 52(3): 223–234.
- [29] Catchpole GS, Beckmann M, Enot DP, et al. Hierarchical metabolomics demonstrates substantial compositional similarity between genetically modified and conventional potato crops[J]. Proc Natl Acad Sci USA, 2005, 102(40): 14458–14462.
- [30] Kim HS, Kim SW, Park YS. Metabolic profiles of genetically modified potatoes using a combination of metabolite fingerprinting and multivariate analysis[J]. Biotechnol Bioproc E, 2009, 14 (6): 738–747.
- [31] Chang YW, Zhao CX, Zhu Z, et al. Metabolic profiling based on LC / MS to evaluate unintended effects of transgenic rice with cryLAc and sck genes [J]. Plant Molecular Biol, 2012, 78 (4–5): 477–487
- [32] Zhou J, Ma CF, Xu HL, et al. Metabolic profiling of transgenic rice with cryIAc and sck genes: An evaluation of unintended effects at metabolic level by using GC-FID and GC-MS[J]. J Chromatogr B, 2009, 877: 725–732.
- [33] Levandi T, Leon C, Kaijurand M. Capillary electrophoresis time-of-flight mass spectrometry for comparative metabolomics of transgenic versus conventional maize[J]. Anal Chem, 2008, 80: 6329–6335.
- [34] Gall GL, Dupont MS, Mellon FA, et al. Characterization and content of flavonoid glycosides in genetically modified tomato

- (Lycopersicon esculentum) fruits[J]. J Agric Food Chem, 2003, 51: 2438–2446.
- [35] Hajimahmoodi M, Vander HY, Sadeghi N, et al. Gas-chromatographic fatty-acid fingerprints and partial least squares modeling as a basis for the simultaneous determination of edible oil mixtures [J]. Talanta, 2005, 66: 1108–1116.
- [36] Ogrinc N, Kosiri J, Spangenberg JE, et al. The application of NMR and MS methods for detection of adulteration of wine, fruit juices, and olive oil. A review [J]. Anal Bioanal Chem, 2003, 376: 424–430.
- [37] Andreotti G, Trivellone E, Lamanna R. Milk identification of different species: 13C-NMR spectroscopy of triacylglycerols from cows and buffaloes' milks[J]. J Dairy Sci, 2000, 83: 2432–2437.
- [38] Wipawee P, takeshi B, Kazuo H, et al. High-throughput technique for comprehensive analysis of Japanese green tea quality assessment using ultra-performance liquid chromatography with time-of-flight mass spectrometry (UPLC/TOF MS)[J]. J Agric food chem, 2008, 56: 10705–10708.
- [39] Surowiec I, Fraser PD, Patel R, et al. Metabolomic approach for the detection of mechanically recovered meat in food products[J]. Food Chem, 2011, 125: 1468–1475.
- [40] Goodacre R, Vaidyanathan S, Bianchi G. Metabolic profiling using direct infusion electrospray ionisation mass spectrometry for the characterisation of olive Oils[J]. Anal, 2002, 127, 1457–1462.
- [41] Son HS, Kim KM, Berg FV, et al. <sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance-based metabolomic characterization of wines by grape varieties and production areas[J]. J Agric Food Chem, 2008, 56: 8007–8016.
- [42] Xu Y, Cheung W, Winder CL, et al. Metabolic profiling of meat:

- assessment of pork hygiene and contamination with Salmonella typhimurium [J]. Anal, 2011, 136(3): 508–514.
- [43] Siripatrawan U, Harte BR. Solid phase microextraction/gas chromatograph/mass spectrometer integrated with chemometrics for detection of Salmonella Typhimurium contamination in a packaged fresh vegetable[J]. Anal Chimi Acta, 2007, 581 (1): 63–70
- [44] Juan MC, Michelle DD, Jose IR. GC-MS based metabolomics for rapid simultaneous detection of escherichia coli O157:H7, salmonella typhimurium, salmonella muenchen, and salmonella hartford in ground beef and chicken[J]. J Food Sci, 2011, 76(4):
- [45] Nakai S, Wang ZH, Dou J, et al. Gas chromatography/ principal component similarity system for detection of E. coli and S. aureus contaminating salmon and hamburger[J]. J Agric Food Chem, 1999, 47(2): 576–583.

(责任编辑:邓伟)

#### 作者简介



刘思洁, 博士, 主任技师, 主要研究 方向为食品安全风险监测与评估。 E-mail: 0928lsj@163.com

吴永宁,博士,研究员,主要研究方 向为食品安全风险监测与评估。

E-mail: wuyongning@cfsa.net.cn