



杨文迪,张亚锋,汪月,等. 基于非靶向代谢组学的甘肃不同地区浆水代谢物差异分析[J]. 轻工学报, 2026,41(3):41-53,75.
YANG W D,ZHANG Y F,WANG Y, et al. Analysis of metabolite differences in Jiang-shui from different regions based on untargeted metabolomics[J]. Journal of Light Industry,2026,41(3):41-53,75.
DOI:10.12187/2026.03.005

基于非靶向代谢组学的甘肃不同地区浆水代谢物差异分析

杨文迪¹,张亚锋²,汪月¹,文鹏程²,张忠明¹,乔海军³,张卫兵¹

1. 甘肃农业大学 食品科学与工程学院,甘肃 兰州 730070;
2. 甘肃农业大学 信息科学技术学院,甘肃 兰州 730070;
3. 甘肃农业大学 理学院,甘肃 兰州 730070

摘要:【目的】研究甘肃省不同地区浆水的代谢组学差异。【方法】采用超高效液相色谱-静电场轨道阱高分辨质谱联用(UHPLC-Orbitrap Exploris™ 480 MS)技术与多元统计分析方法对甘肃省定西市、兰州市和天水市3个地区的浆水样品进行非靶向代谢组学检测与分析。【结果】3个地区浆水样品中共检测到1746种代谢物,在正、负离子模式分别有1107种和639种,其中脂质及类脂质分子219种、苯基丙酮和多酮类化合物96种、有机杂环化合物446种、有机酸及其衍生物360种、萜类化合物284种、有机氧化合物183种、有机氮化合物49种、有机硫化合物5种。天水浆水样品与其余2个地区浆水样品间表现出明显的差异性,而这2个地区浆水样品之间存在一定的相似性。通过正交偏最小二乘-判别分析(OPLS-DA)($VIP>1$ 且 $P<0.05$)共筛选出568种差异代谢物,包括36种呈味代谢物,其中酸味和苦味物质是影响浆水滋味的主要代谢物,而酸味物质主要聚集在天水浆水中,苦味物质主要聚集在兰州浆水中。筛选到的21种生物活性物质中,酚酸类化合物和有机酸含量较为丰富。通过京都基因与基因组百科全书(KEGG)注释并确定了丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢通路为3个地区差异代谢物显著富集的重要代谢途径。【结论】不同地区浆水样品在代谢物组成、含量及代谢途径方面均存在显著差异,可为深入了解甘肃浆水品质形成机制提供参考。

关键词:甘肃浆水;非靶向代谢组学;差异代谢物;生物活性物质;代谢通路

中图分类号:TS255.5 **文献标识码:**A **文章编号:**2096-1553(2026)03-0041-13

0 引言

浆水是我国西北地区特色传统发酵蔬菜食品,历史悠久,可追溯到商末时期。据《吕氏春秋》记载,周文王喜食菖蒲制成的“酸菜”,即浆水^[1]。甘

肃浆水清淡,色泽和味道与柠檬汁相近,与陕南一带做法基本相同,但原料更为丰富,主要有芹菜、莲花菜、苦苣、萝卜、萝卜缨、苜蓿、圆根菜等^[2]。浆水的制作工艺为:将焯水后的新鲜蔬菜倒入面汤或米汤,再加入老浆水作为“引子”,经多种微生物协同

收稿日期:2025-09-10;修回日期:2025-10-17;出版日期:2026-06-15

基金项目:甘肃省自然科学基金项目(24JRRA652,24JRRA634);国家自然科学基金项目(32460576)

作者简介:杨文迪(1999—),女,甘肃省定西市人,甘肃农业大学硕士研究生,主要研究方向为食品风味物质。E-mail:45330301@qq.com

通信作者:张卫兵(1974—),男,陕西省岐山县人,甘肃农业大学教授,主要研究方向为食品加工。E-mail:13609323472@qq.com

发酵产生酸味而成^[3]。发酵成熟的浆水呈乳白色,具有酸醇清香的口感,可直接饮用或作为一种酸味调味品使用^[4]。浆水富含维生素C、有机酸、氨基酸等营养成分,其中,维生素能够促进钙和铁的体内吸收;醋酸、乳酸、柠檬酸、琥珀酸等有机酸可调节人体酸碱平衡,且乳酸还可降低肠道pH值,抑制有害菌生长繁殖^[5]。此外,浆水还具有清热解暑、调中引气、调理肠胃、降血压等功效^[6]。

发酵蔬菜的独特风味与其代谢物密切相关,这些代谢物包括挥发性和非挥发性两类^[7]。近年来,浆水研究主要聚焦于挥发性风味物质和生产工艺方面。例如,李宏珍等^[8]采用顶空固相微萃取结合气相色谱-质谱法分析了甘肃天水浆水发酵过程中挥发性风味物质的动态变化,确定双戊烯、乙酸乙酯、己醛、蒎烯等8种物质为浆水的主体风味物质。代安娜等^[9]采用相同方法对甘肃兰州浆水中挥发性风味物质进行分析,检测到醛酮类、烃类、醇类、酯类等29种挥发性风味物质。李多佳等^[10]研究了不同加热处理后甘肃天水浆水的挥发性风味物质及其变化,发现醛类、酯类和含硫氮化合物增多,且主体风味物质发生了较大变化。

非靶向代谢组学是一种强大的分析手段,可对生物系统内的代谢物进行全面表征,能够在无需预先设定目标的前提下,鉴定广谱的化学物质,有助于探究与各类生理、环境及病理状态相关的代谢变化。多项研究已证实该方法在食品场景中的应用。例如,D. F. Tan等^[11]采用非靶向代谢组学结合超高效液相色谱-质谱技术研究牛奶光氧化过程,揭示了受氧气暴露与光照强度影响的特征性代谢物;L. Formisano等^[12]利用非靶向代谢组学阐明了不同光质处理下蔬菜幼苗的生化变化,体现了该方法检测环境因素介导的广泛生化调控的能力。

然而,关于浆水中非挥发性代谢物的研究鲜有报道,且多聚焦于单一有机酸成分的探究^[13-15]。另外,有关发酵浆水整体代谢物及其相关代谢途径的深入探索也较为有限。鉴于此,本研究拟以甘肃省具有地理代表性、饮食文化典型性和原料多样性的定西市、兰州市和天水市浆水为研究对象,采用超高效液相色谱-静电场轨道阱高分辨质谱联用

(Ultra-High Performance Liquid Chromatography-Orbitrap Exploris™ 480 Mass Spectrometry, UHPLC-Orbitrap Exploris™ 480 MS)技术,结合多元统计分析方法对这3个地区浆水中的代谢物进行系统分析,同时筛选差异代谢物,并对代谢途径进行挖掘,以深入探究发酵过程中浆水风味形成的具体机制。

1 材料与方法

1.1 主要材料与试剂

材料:从甘肃省定西市、兰州市和天水市采集了以芹菜为原料,发酵时长为4~5 d,成熟且风味处于最佳状态下的18份浆水样品(每市6份),为确保样品具有代表性,每份浆水样品均于同一时间从同一发酵批次的陶缸中采集,装入无菌采样袋后低温运输至实验室,均于-80℃条件下保存。这些样品分别以地名简写命名为DX1、DX2、DX3、DX4、DX5、DX6、LZ1、LZ2、LZ3、LZ4、LZ5、LZ6、TS1、TS2、TS3、TS4、TS5、TS6。

试剂:乙腈、乙酸铵、甲醇和氨水,均为色谱纯,北京百灵威科技有限公司。

1.2 主要仪器与设备

Agilent 1290 Infinity 型UHPLC仪、AB Triple TOF 6600型MS仪,美国Agilent公司;JXFSTPRT-CL型研磨仪,上海净信实业有限公司;AL104型电子天平,德国METTLER TOLEDO公司;5430R型低温高速离心机,德国Eppendorf公司;JP-100型超声仪,深圳市洁盟清洗设备有限公司;ACQUITY UPLC BEH Amide型色谱柱(1.7 μm×2.1 mm×100 mm),美国Waters公司;QT-1型涡旋仪,上海琪特分析仪器有限公司。

1.3 实验方法

1.3.1 代谢物提取 将浆水样品在4℃环境下缓慢解冻后,取适量加入预冷甲醇-乙腈-水溶液(甲醇、乙腈与水体积比2:2:1),涡旋混匀,低温超声30 min,于-20℃条件下静置10 min,随后于4℃、11 481 r/min条件下离心20 min,取上清液进行真空干燥;MS分析时需加入100 μL乙腈-水溶液(乙腈与水体积比1:1)进行复溶,涡旋混匀,于4℃、11 481 r/min条件下离心15 min,取上清液进行

分析。

1.3.2 UHPLC-MS 检测 1)UHPLC 条件。将样品置于 4 °C 自动进样器中,采用 UHPLC 仪中的 HILIC 色谱柱进行分离:柱温为 25 °C;流速为 0.5 mL/min;进样量为 2 μL;流动相组成 A 为水+25 mmol/L 乙酸铵+25 mmol/L 氨水,B 为乙腈。梯度洗脱程序如下:0~0.5 min,B 维持在 95% (体积分数,下同);0.5~7.0 min,B 从 95% 线性变化至 65%;7.0~8.0 min,B 从 65% 线性变化至 40%;8.0~9.0 min,B 维持在 40%;9.0~9.1 min,B 从 40% 线性变化至 95%;9.1~12.0 min,B 维持在 95%。为避免仪器检测信号波动造成影响,采用随机顺序对样品进行连续分析。样品队列中插入 QC (质控) 样品,用于监测和评价系统的稳定性及实验数据的可靠性。

2)MS 条件。样品经 UHPLC 仪分离后,用 MS 仪进行分析,并分别采用电喷雾电离 (ESI) 正、负离子模式进行检测。具体参数设置如下:雾化气辅助加热气 1 (Gas1) 为 50,辅助加热气 2 (Gas2) 为 2,离子源温度为 350 °C,喷雾电压 (ISVF) 正离子模式为 3500 V,负离子模式为 2800 V;一级、二级质荷比检测范围均为 70~1200 Da,一级、二级分辨率均为 60 000,一级、二级扫描累积时间均为 100 ms,二级采用分段式采集方法,动态排除时间为 4 s。

1.4 数据处理

每组实验均重复测定 3 次,以 (平均值±标准差) 表示。采用 Excel 2019 和 Origin 2024 软件绘制热图、柱状图。在京都基因与基因组百科全书 (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes, KEGG)、人类代谢组数据库 (Human Metabolome Database, HMDB) 和 Lipidmaps 数据库中检索、鉴定化合物,获取分类与通路信息,随后使用 SIMCA 14.1 软件构建正交偏最小二乘法-判别分析 (Orthogonal Partial to Least Squares-Discriminant Analysis, OPLS-DA) 模型,综合差异倍数、*P* 值和变量投影重要度 (Variable Importance in the Projection, VIP) 筛选差异代谢物。此外,使用 VirtualTaste 1.0 工具 (<https://insilico-cyp.charite.de/VirtualTaste/>) 预测化合物的风味特征:首先输入化合物名称,从 PubChem 官网 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) 下载 SDF 格式分子文

件,最后上传分子文件并提交预测。

2 结果与分析

2.1 不同地区浆水非挥发性代谢物统计分析

本研究在正、负离子模式下分别鉴定到 1107 种和 639 种代谢物,包括脂质、有机类等关键类别,其中在 HMDB 数据库分别定性到 392 种、292 种代谢物,在 KEGG 数据库中分别定性到 532 种、328 种代谢物。

浆水样品中代谢物分类见表 1。由表 1 可知,3 个地区浆水中共鉴定出 1746 种非挥发性代谢物,主要包括脂质及类脂质分子、苯基丙酮和多酮类化合物等 11 类,其中有机杂环化合物、有机酸及其衍生物和苯类化合物占比最高,分别有 446 种、360 种和 284 种,且三者占代谢物总数的 62%;有机硫化物占比最小,仅 5 种。

相对含量前 20 位的代谢物序列百分比堆积柱形图如图 1 所示。由图 1 可知,不同地区浆水样品之间的代谢物在相对含量占比上存在显著差异,表明这 3 个地区浆水具有不同的代谢特征。具体而言,定西浆水样品中代谢物相对含量较高的有 3-(2-氯苯基)-1H-吡唑-5-羧酸 (DX2、DX3、DX4),L(-)-3-苯乳酸,DL-3-苯乳酸,(±)-2-羟基异己酸 (DX2、DX3、DX4、DX5),β-高脯氨酸 (DX2、DX3、DX4) 和甘油磷酸胆碱 (DX1、DX5);兰州浆水样品中代谢物相对含量较高的有 3-(2-

表 1 浆水样品中代谢物分类

Table 1 Classification of metabolites in Jiang-shui samples from different regions

分类	正离子		负离子	
	种类/种	占比/%	种类/种	占比/%
脂质及类脂质分子	143	13.17	76	12.10
苯基丙酮和多酮类化合物	47	4.33	49	7.80
有机杂环化合物	314	28.91	132	21.02
有机酸及其衍生物	227	20.90	133	21.18
苯类化合物	178	16.39	106	16.88
有机氧化物	73	6.72	110	17.52
核苷、核苷酸和类似物	15	1.38	11	1.75
生物碱及其衍生物	24	2.21	4	0.64
木酚素、新木酚素及相关化合物	14	1.29	4	0.64
有机氮化合物	47	4.33	2	0.32
有机硫化物	4	0.37	1	0.16

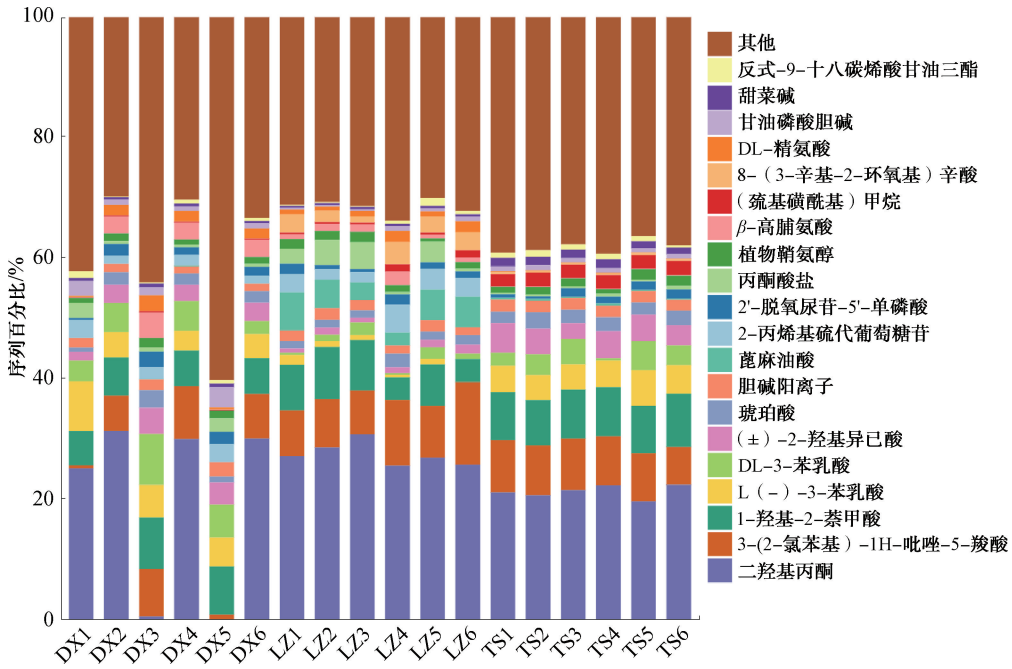


图1 相对含量前20位的代谢物序列百分比堆积柱形图

Fig. 1 Stacked percentage bar chart of the top 20 metabolites ranked by relative abundance

氯苯基)-1H-吡唑-5-羧酸、蓖麻油酸、2-丙烯基硫代葡萄糖苷、丙酮酸盐和8-(3-辛基-2-环氧基)辛酸;天水浆水样品中代谢物相对含量较高的有3-(2-氯苯基)-1H-吡唑-5-羧酸、L(-)-3-苯乳酸、DL-3-苯乳酸和(±)-2-羟基异己酸。二羟基丙酮和1-羟基-2-萘甲酸在所有组别中占比都很高,表明二者可能是关键代谢物。

不同地区浆水代谢物含量聚类热图如图2所示。由图2可知,定西浆水样品中代谢物相对含量较高的为3-(2-羟基苯基)丙酸、D-葡萄糖酸和甘油磷酸胆碱;兰州浆水样品中代谢物相对含量较高的为丙酸、琥珀酸、丙酮酸盐、胆碱阳离子、1-羟基-2-萘甲酸和植物鞘氨醇;天水浆水样品中甜菜碱相对含量较高,其他代谢物相对含量无明显差异。

2.2 不同地区浆水非挥发性代谢物差异分析

主成分分析(PCA)是代谢组学中常用的一种多变量分析方法,可以识别样品组间的显著差异^[16]。不同地区浆水正、负离子模式下代谢物的PCA图如图3所示。由图3可知,在正离子模式下,3个地区浆水样品的第一主成分(PC1)有47.8%的方差贡献率,第二主成分(PC2)有25.9%的方差贡献率,累计方差贡献率为73.7%。在负离子模式下,3个地区浆水样品的PC1有42.7%的方差贡献率,

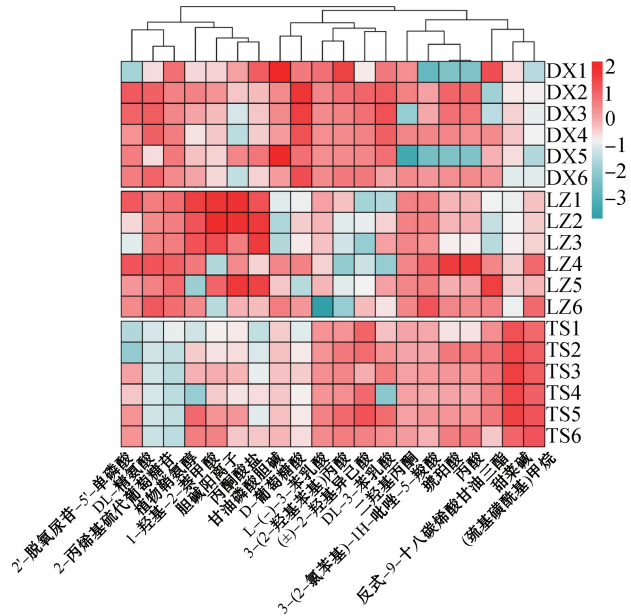


图2 不同地区浆水代谢物含量聚类热图

Fig. 2 Cluster heatmap of metabolite abundances in Jiang-shui from different regions

PC2有30.3%的方差贡献率,累计方差贡献率为73.0%。在正、负离子模式下,定西和兰州浆水样品聚集在一起,而天水浆水样品表现出明显的分离;此外,定西浆水样品组内明显分离,而兰州和天水浆水样品组内聚集在一起,表明不同地区浆水样品非挥发性代谢物组成具有明显的差异性。

OPLS-DA 是一种有监督的判别分析统计方法,

能有效预测变量,并更清晰地反映样品组间差异。为比较不同地区浆水样品之间的代谢物差异,对3个地区浆水样品进行了 OPLS-DA 模型分析,结果如图4所示。由图4a)可知,不同地区浆水样品呈现明显的空间分离,同一地区浆水样品紧密聚集在一起,表明各地区浆水样品中代谢物特征存在显著差异。在95%置信区间下进行200次随机排列, $R_x^2=0.605$, $R_y^2=0.987$, $Q^2=0.961$,均大于0.5,表明该模型具有较好的稳定性和预测能力。由图4b)可知, Q^2 回归线与横坐标相交,且交于y轴负半轴,表明模型未出现过拟合现象,具有可靠性^[17]。

代谢物的VIP越大,表明代谢物在判别分析过

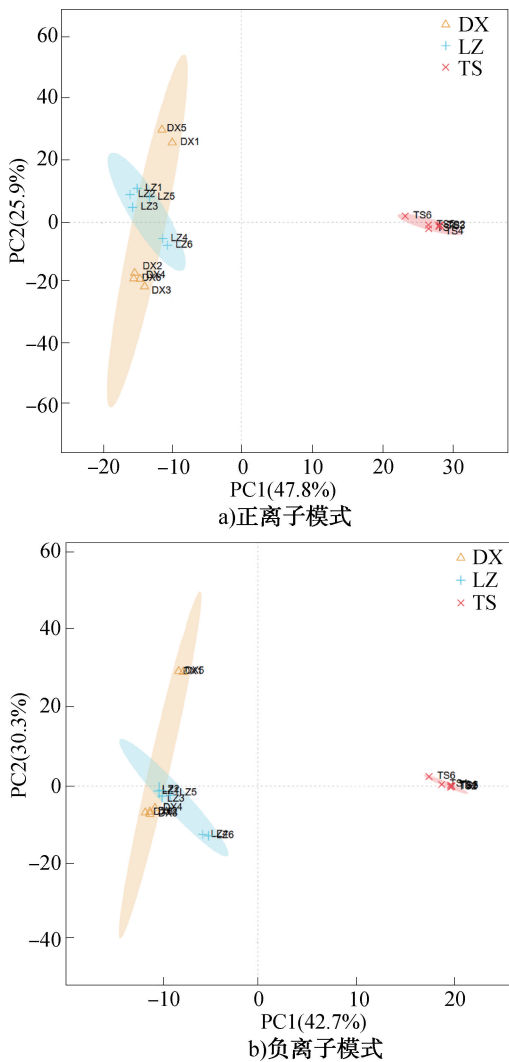


图3 不同地区浆水正、负离子模式下代谢物的PCA图

Fig. 3 PCA plots of metabolites in Jiang-shui form different regions in positive and negative ion modes

程中的作用越大。一般来说, $VIP>1$ 的代谢物对判别分析的贡献较大,这些代谢物在组间具有较大差异^[18]。代谢物的 OPLS-DA 重要性如图5所示,其中黄色区域中标出名称的代谢物是校正后 $P<0.05$ 、 $VIP>1$ 的最显著(P 值最小)代谢物,也是3个地区浆水样品中的差异代谢物,共筛选到568种。图5重点显示了VIP最高的13种差异代谢物,具体为5-氨基戊酸、4-羟基苯乙醇、色胺、大黄素-8-葡萄糖苷、2-丙烯基硫代葡萄糖苷、缬氨酸、庚二酸、吡啶丙烯酸、酪胺、喹啉-2,4-二醇、1,4-D-木二糖、芹菜苷和5-D-木糖。

2.3 不同地区浆水差异代谢物鉴定结果分析

代谢物差异倍数(Fold Change,FC)能衡量组间变化的大小。基于对3个地区浆水的非挥发性代谢

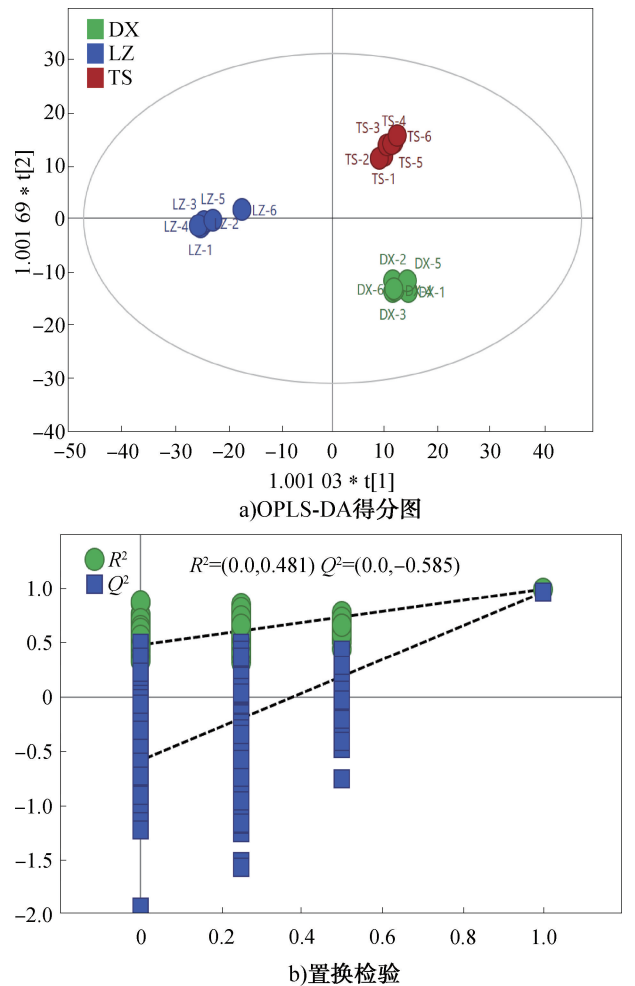


图4 不同地区浆水非挥发性代谢物的OPLS-DA分析

Fig. 4 OPLS-DA analysis of non-volatile metabolites in Jiang-shui from different regions

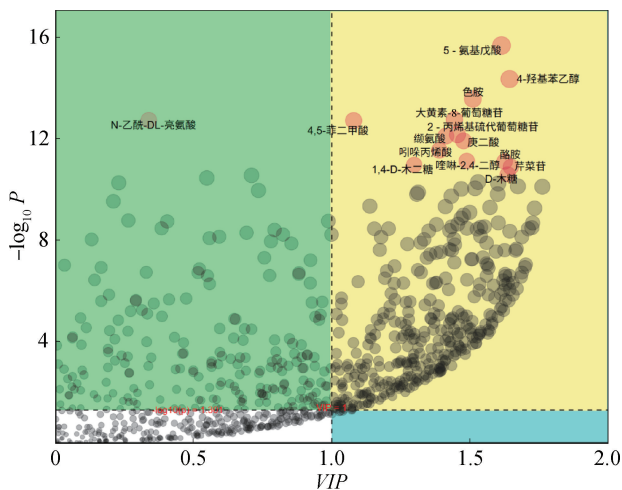


图5 代谢物的OPLS-DA重要性图

Fig. 5 OPLS-DA variable importance of metabolites

物定性定量分析,笔者通过两两组间比较 ($|\log_2(FC)| > 1, P < 0.05$) 筛选出差异代谢物,并利用其 $\log_2(FC)$ 绘制散点图以可视化其差异趋势,结果如图6所示,其中每个点代表1种代谢物,红色点表示显著上调的代谢物,绿色点表示显著下调的代谢物,灰色三角形为没有明显差异的代谢物。由图6a)可知,与天水浆水样品相比,兰州浆水样品共有865种差异代谢物,其中上调的有431种,下调的有434种,最显著(P 值最小)的15种差异代谢物为异戊酰-L-肉碱、康宁菌素D、1,4-D-木二糖、7-羟基-9,10,14-三甲氧基-2-甲基-3,4,5,6-四氢-2H,8H-2,6-环氧氧杂辛因并[3,2-b]咕吨-8-酮、喹啉-2,4-二醇、蛇床子酚、4[(乙氨基)羰基氨基]苯甲酸、2-甲基-1H-吲哚-3-甲醛、色胺、1-(苯并[d][1,3]二氧杂环戊烯-4-基)-2-(甲氨基)戊-1-酮、5-氨基戊酸、 α -麦角隐亭、2-苯基-5H,6H-[1,2,4]三唑并[1,5-c]喹啉-5-酮、4,5-菲二甲酸和乙酰-dl-亮氨酸。由图6b)可知,与兰州浆水样品相比,定西浆水样品共有330种差异代谢物,其中上调的有175种,下调的有155种,最显著的15种差异代谢物为4-氨基-3-(三氟甲基)苯基氨基甲酸叔丁酯、组胺、4-哌啶甲酰胺、雷米普利拉、4-氨基吡啶、7H-吡咯并[3,2-f]喹啉-1,3-二胺、小白菊内酯、异丙菌胺、1-乙基- β -咔啉、环氧唑、对羟基苯乳酸、4-吡哆酸、二肽酶B、N-乙酰-DL-亮氨酸和2-甲基-1H-吲哚-3-甲醛。由图6c)可知,定西浆水样品共有848种差异代谢物,其中上调的有423

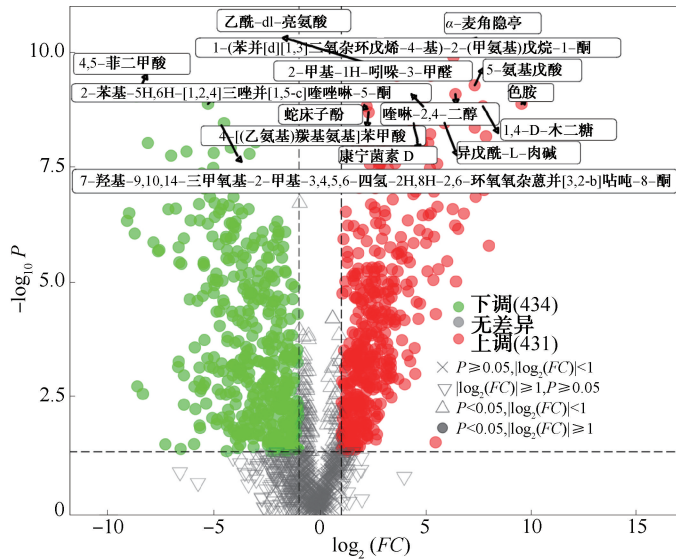
种,下调的有425种,最显著的15种差异代谢物为色胺、靛红、吲哚丙烯酸、O-叔丁基-L-苏氨酸甲酯、5-氨基戊酸、庚二酸、4-羟基苯乙醇、长春质碱、酪胺、缬氨酸、 β -羟基苯丙氨酸、丁硫氨酸亚砷亚胺、5,6-二氟-1H-吲哚-3-乙酸、 $7\alpha, 25$ -二羟基胆固醇和 $7\alpha, 12\alpha$ -二羟基- 5β -胆甾烷-3-酮。

平均下降准确度为随机森林预测准确性的降低程度,该值越大,代谢物在随机森林中的重要性越大。随机森林中最重要15种差异代谢物如图7所示。由图7可知,这些代谢物在不同地区浆水间具有较大差异,其中L-蛋氨酸、9-氟-11,17,21-三羟基孕甾-1,4-二烯-3,20-二酮、1,24-二羟基维生素D3和2-咪喃甲酸在定西浆水样品中含量较高,N-乙酰- β -丙氨酸和D-赤型-咪唑甘油磷酸在兰州浆水样品中含量较高,D-苏糖醇、大黄酸、替诺福韦、3-甲氧基吲哚、4-哌啶甲酰胺、正亮氨酸、莽草酸和二苯喹吡啶阳离子在天水浆水样品中含量较高。

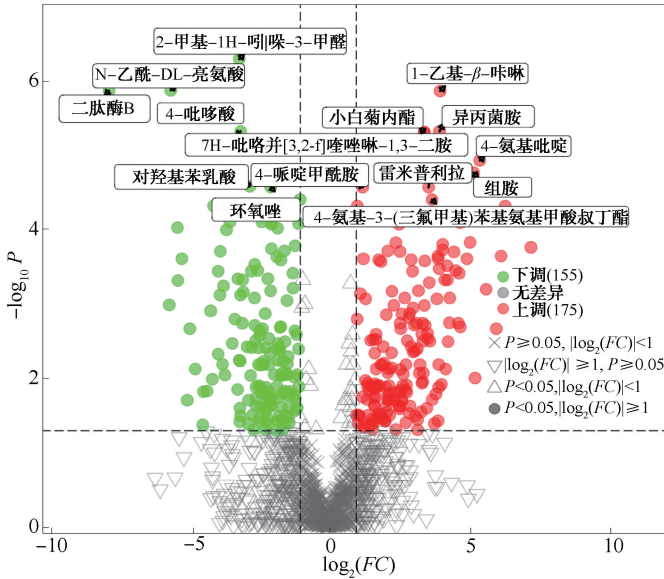
2.4 呈味代谢物差异分析

本研究采用VirtualTaste 1.0工具对从前文筛选所得的36种差异代谢物($P < 0.05, VIP > 1$)的味觉属性进行评估^[16],结果见表2。由表2可知,鉴定出的呈味代谢物中,8种与甜味相关,13种与酸味相关,15种与苦味相关。

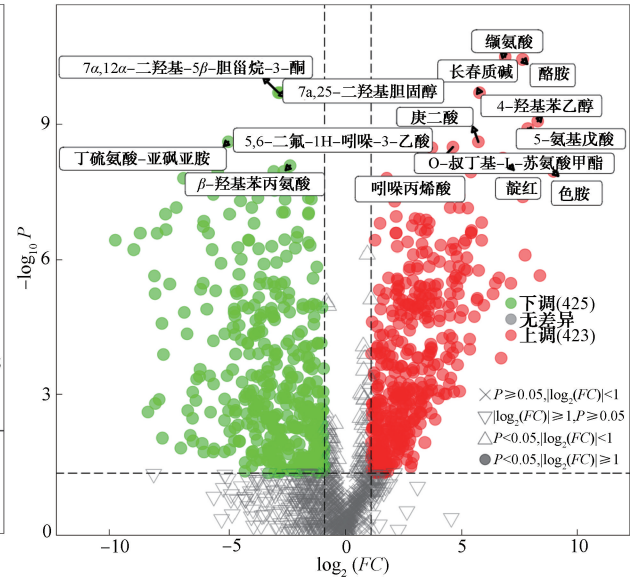
对上述36种具有风味特征的呈味代谢物进行差异显著性判断和聚类分析,结果如图8所示,其中星标表示该物质与方框所示味觉属性对应;不同小写字母表示组间差异显著($P < 0.05$),下同。由图8a)可知,天水浆水样品的甜味物质和苦味物质含量均显著高于其余2个地区浆水样品($P < 0.05$)。兰州浆水样品的酸味物质含量显著高于其余2个地区浆水样品($P < 0.05$)。由图8b)可知,3个地区浆水样品表现出明显的分离趋势,呈味代谢物含量差异明显。此外,由图8c)可知, α -亚麻酸、旋覆花内酯、异丙菌胺等苦味物质主要聚集在兰州浆水样品中,异马钱定、二脯氨酸B等甜味物质主要聚集在定西浆水样品中,而天水浆水样品中酸味物质较多,主要包括3-脱氢莽草酸、壬二酸、反式创伤酸、莽草酸、龙胆酸、乳酰水杨酸和庚二酸。其中3-脱



a) 兰州和天水浆水样品差异代谢物



b) 定西和兰州浆水样品差异代谢物



c) 定西和天水浆水样品差异代谢物

图 6 差异代谢物火山图

Fig. 6 Volcano plots of differential metabolites

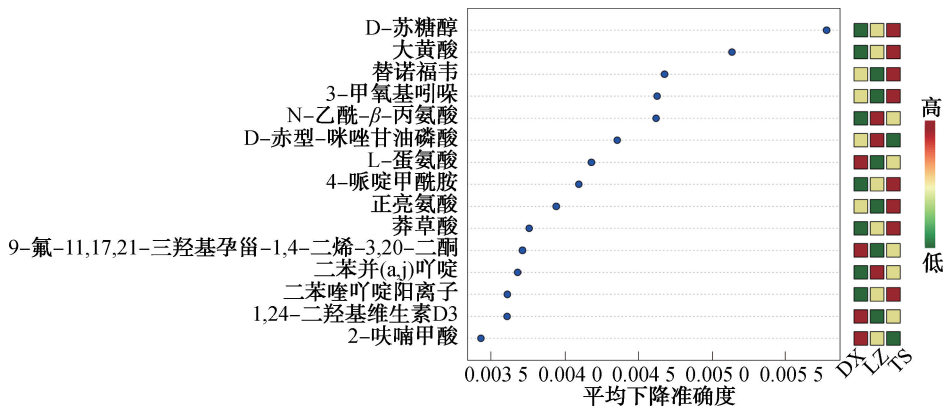


图 7 随机森林中最重要 15 种差异代谢物

Fig. 7 The 15 most important differential metabolites in random forests

表2 不同地区浆水味觉属性及呈味代谢物含量

Table 2 Taste properties and contents of taste-related metabolites in Jiang-shui from different regions

<i>m/z</i>	<i>VIP</i>	化合物名称	味觉属性		DX	LZ	TS
			味觉	预测置信度			
118.09	1.213	5-氨基戊酸	甜	0.633	(8.15±0.43)E+06 ^{bc}	(1.09±0.37)E+07 ^b	(2.72±0.31)E+09 ^a
565.16	1.207	芹菜苷	甜	0.732	(9.83±0.28)E+08 ^a	(5.53±0.83)E+08 ^b	(2.33±0.06)E+07 ^c
433.11	1.218	芦荟宁	甜	0.929	(1.10±0.53)E+08 ^b	(2.69±0.14)E+08 ^a	(2.85±0.12)E+06 ^c
118.09	1.194	甜菜碱	甜	0.710	(3.23±0.88)E+09 ^{bc}	(3.10±0.63)E+09 ^b	(1.15±0.22)E+10 ^a
182.00	1.270	糖精	甜	0.993	(6.72±0.31)E+07 ^{bc}	(2.14±0.35)E+08 ^b	(2.50±0.38)E+09 ^a
343.13	1.373	乳糖醇	甜	0.997	(9.63±0.69)E+07 ^b	(1.21±0.40)E+09 ^a	(1.82±0.16)E+07 ^{bc}
160.04	1.316	马尿酸	甜	0.657	(4.71±0.55)E+06 ^c	(1.69±0.29)E+07 ^b	(8.35±0.15)E+07 ^a
447.09	1.319	胭脂红酸	甜	0.667	(1.58±0.16)E+08 ^a	(2.58±0.26)E+07 ^b	(2.15±0.10)E+07 ^{bc}
125.06	1.207	庚二酸	酸	0.963	(4.00±0.41)E+06 ^b	(3.00±0.10)E+06 ^{bc}	(3.27±0.42)E+08 ^a
227.13	1.400	反式创伤酸	酸	0.924	(1.37±0.56)E+08 ^b	(3.11±0.61)E+07 ^c	(5.33±0.64)E+08 ^a
137.03	1.398	莽草酸	酸	0.823	(6.17±0.31)E+06 ^{bc}	(4.25±0.12)E+07 ^b	(2.12±0.65)E+08 ^a
187.10	1.177	壬二酸	酸	0.963	(6.73±0.15)E+07 ^b	(5.27±0.14)E+07 ^{bc}	(1.17±0.38)E+09 ^a
149.06	1.670	反式肉桂酸酯	酸	0.890	(2.31±0.78)E+07 ^a	(1.87±0.78)E+06 ^c	(1.10±0.19)E+07 ^b
279.23	1.215	乳酰水杨酸	酸	0.788	(3.44±0.16)E+06 ^b	(8.01±0.31)E+06 ^{bc}	(4.87±0.51)E+06 ^a
297.24	1.645	蓖麻油酸	酸	0.788	(2.94±0.44)E+08 ^{bc}	(3.60±0.14)E+10 ^a	(2.18±0.37)E+09 ^b
279.23	1.148	亚油酸	酸	0.788	(8.26±0.79)E+08 ^a	(3.73±0.17)E+08 ^{ab}	(1.27±0.26)E+07 ^{bc}
153.02	1.148	3-脱氢莽草酸	酸	0.802	(8.33±0.44)E+07 ^{bc}	(1.73±0.14)E+08 ^b	(1.22±0.36)E+09 ^a
153.02	1.276	龙胆酸	酸	0.710	(5.82±0.48)E+07 ^c	(2.93±0.11)E+08 ^b	(1.40±0.25)E+09 ^a
165.04	1.509	D-阿拉伯糖酸	酸	0.968	(4.36±0.17)E+08 ^a	(8.19±0.25)E+07 ^c	(3.28±0.23)E+08 ^{ab}
195.06	1.173	反式阿魏酸	酸	0.775	(1.93±0.09)E+08 ^{abc}	(2.67±0.47)E+08 ^a	(2.06±0.39)E+08 ^{ab}
129.02	1.303	L-2-羟基戊二酸	酸	0.987	(7.46±0.35)E+08 ^{bc}	(1.28±0.05)E+09 ^a	(1.17±0.12)E+09 ^{ab}
328.22	1.679	二脯氨酸 B	苦	0.807	(5.63±0.16)E+07 ^a	(2.68±0.16)E+05 ^{bc}	(1.54±0.50)E+06 ^b
144.08	1.212	色胺	苦	0.858	(9.73±0.31)E+06 ^b	(7.12±0.34)E+06 ^{bc}	(7.96±0.41)E+09 ^a
429.21	1.249	异马钱定	苦	0.917	(1.23±0.22)E+08 ^a	(3.06±0.58)E+07 ^b	(1.54±0.58)E+06 ^c
185.13	1.706	小白菊内酯	苦	0.953	(5.99±0.14)E+06 ^c	(6.56±0.23)E+07 ^a	(2.58±0.38)E+07 ^b
291.16	1.222	旋覆花内酯	苦	0.738	(1.45±0.70)E+07 ^b	(3.71±0.23)E+07 ^a	(1.48±0.50)E+06 ^{bc}
173.11	1.184	长春质碱	苦	0.964	(9.14±0.31)E+06 ^{bc}	(1.05±0.11)E+07 ^b	(7.30±0.19)E+08 ^a
184.06	1.630	4-吡哆酸	苦	0.665	(2.37±0.06)E+09 ^{ab}	(2.58±0.05)E+08 ^c	(2.78±0.09)E+09 ^a
222.11	1.628	氢化可他宁	苦	0.688	(7.60±0.14)E+07 ^a	(1.56±0.36)E+07 ^c	(3.65±0.73)E+07 ^b
254.16	1.638	假木贼胺	苦	0.993	(9.27±0.51)E+07 ^a	(5.74±0.29)E+06 ^{bc}	(3.00±0.75)E+07 ^b
236.11	1.551	钩吻碱	苦	0.926	(3.86±0.23)E+06 ^{bc}	(6.66±0.54)E+07 ^a	(6.77±0.23)E+06 ^b
203.14	1.639	异丙菌胺	苦	0.688	(4.66±0.11)E+06 ^{bc}	(7.20±0.35)E+07 ^a	(1.09±0.28)E+07 ^b
112.09	1.622	组胺	苦	0.821	(1.65±0.08)E+08 ^c	(5.99±0.19)E+09 ^a	(5.97±0.17)E+09 ^{ab}
206.05	1.502	黄尿酸	苦	0.670	(2.47±0.10)E+08 ^{ab}	(3.56±0.17)E+07 ^c	(2.59±0.09)E+08 ^a
279.23	1.423	α-亚麻酸	苦	0.629	(1.95±0.53)E+07 ^{bc}	(3.69±0.77)E+07 ^a	(3.76±0.14)E+07 ^b
293.03	1.359	菊苣酸	苦	0.526	(7.32±0.47)E+07 ^c	(2.06±0.05)E+08 ^a	(1.48±0.03)E+08 ^b

注:同行不同肩标小写字母表示组间差异显著($P<0.05$),下同。

氢莽草酸是芳香族氨基酸生物合成代谢途径中一种重要的中间产物,可作为一种化学合成制剂和药物的中间原料^[20]。

2.5 生物活性物质差异分析

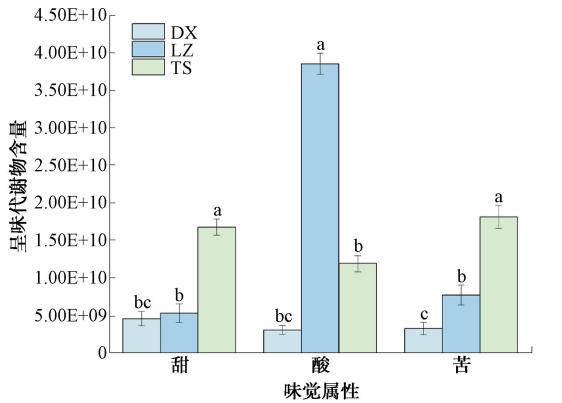
生物活性物质是指天然或人工合成的化合物,能够通过调节细胞信号通路、代谢过程或基因表达,对生物体的生理功能产生特异性影响^[21]。从不

同浆水样品 568 种差异代谢物中筛选得到 20 种重要生物活性物质,见图 9 和表 3。由图 9 和表 3 可知,这 21 种生物活性物质包括 8 种酚酸类化合物、2 种黄酮类化合物、3 种维生素和 8 种有机酸。其中酚酸类化合物和有机酸占比较高,含量较为丰富,特别是有机酸,其含量显著高于其他生物活性物质($P<0.05$)。此外,兰州浆水样品中酚酸类化合物和

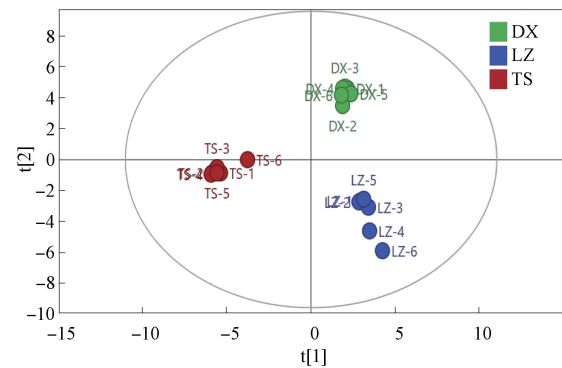
有机酸含量均显著低于其余 2 个地区浆水样品 ($P < 0.05$);天水浆水样品中酚酸类化合物和维生素含

量均显著高于其余 2 个地区浆水样品 ($P < 0.05$);定西浆水样品中黄酮类化合物和有机酸均显著高于其余 2 个地区浆水样品 ($P < 0.05$)。综上所述,3 个地区浆水样品在生物活性物质的组成和含量上均存在明显差异,这些差异可能直接影响其抗氧化活性和代谢调控功能。

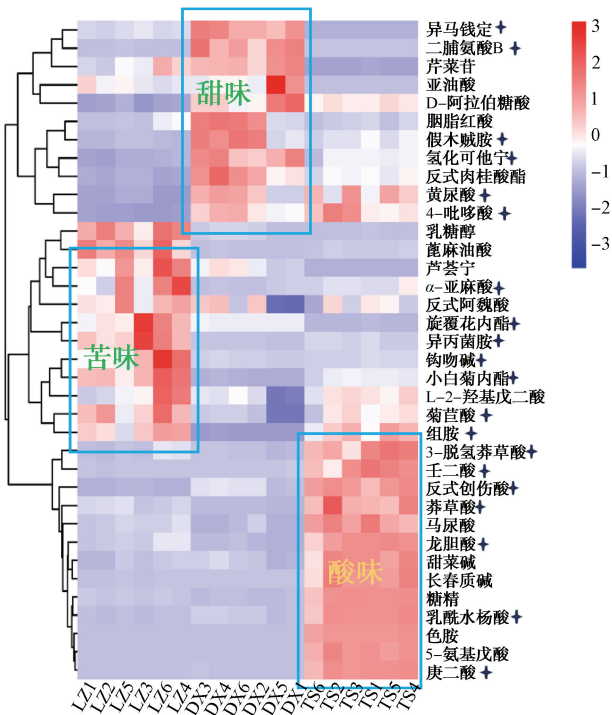
酚酸类化合物是植物次生代谢的重要产物,在浆水发酵过程中可能通过植物原料释放或微生物转化而累积,具有抗氧化、抗炎、调节肠道菌群及代谢等多重作用^[22]。黄酮类化合物包括芹菜苷和二查曼黄酮,其组成与含量受蔬菜(如芹菜)本身的影响较显著。研究^[23]发现,芹菜富含类黄酮等生物活性物质,其中芹菜素、芹菜苷、芹菜甲素、木栓酮、木犀黄酮等多种黄酮协同作用,赋予浆水显著的抗氧化能力。维生素主要为 B 族维生素(维生素 B5 和 B6),其中维生素 B5(泛酸)在身体所需三大能量物质(糖类、脂类、蛋白质)的代谢过程中发挥重要作用,通过参与能量物质生成和神经递质合成,对神经系统功能及细胞新陈代谢具有重要影响。维生素 B6(吡哆醇)在氨基酸代谢、能量产生、神经递质合成等方面具有重要作用^[24]。此外,有机酸主要以乳酸和苹果酸为主,作为抑菌物质能够维持浆水的酸碱动态平衡,抑制浆水中腐败菌生长^[25-26]。



a)呈味代谢物含量差异



b)OPLS-DA 差异性分析结果



c)呈味代谢物聚类热图

图 8 呈味代谢物的差异显著性判断和聚类分析结果
Fig. 8 Results of significance judgment and cluster analysis of taste-related metabolites

2.6 差异代谢通路分析

通过 KEGG 数据库对不同地区浆水样品筛选出的差异代谢物进行富集分析(Over-Representation Analysis,ORA),其结果如图 10 所示。由图 10 可知,3 个地区浆水样品的代谢通路分布在 18 条代谢

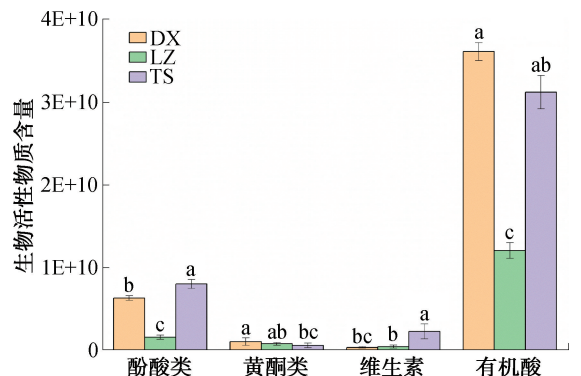


图 9 生物活性物质的差异显著性分析结果
Fig. 9 Results of differential significance analysis of biologically active substances

表3 21种重要生物活性物质及其含量
Table 3 21 kinds of important biologically active substances and their contents

种类	化合物名称	DX	LZ	TS
酚酸类	3-(2-羟基苯基)丙酸	(5.48±0.15)E+09 ^b	(1.11±0.05)E+09 ^c	(7.35±0.14)E+09 ^a
	4-羟基苯甲酸酯	(2.58±0.14)E+07 ^{bc}	(3.99±0.41)E+07 ^b	(9.70±0.15)E+07 ^a
	3-O-香豆酰奎宁酸	(4.41±0.32)E+07 ^{bc}	(7.88±0.38)E+07 ^b	(3.55±0.15)E+08 ^a
	反式阿魏酸	(1.93±0.09)E+08 ^{abc}	(2.67±0.05)E+08 ^a	(2.06±0.04)E+08 ^{ab}
	没食子酸	(4.81±0.24)E+07 ^a	(4.70±0.32)E+07 ^{ab}	(6.32±0.21)E+06 ^c
	3-O-阿魏酰奎宁酸	(5.00±0.38)E+08 ^a	(2.60±0.56)E+07 ^b	(7.26±0.51)E+06 ^{bc}
	咖啡酸	(1.84±0.08)E+07 ^a	(2.94±0.03)E+06 ^b	(2.32±0.02)E+06 ^{bc}
	新绿原酸	(1.95±0.12)E+06 ^{ab}	(7.83±0.12)E+06 ^a	(8.11±0.52)E+05 ^{abc}
黄酮类	芹菜苷	(9.83±0.19)E+08 ^a	(5.53±0.27)E+08 ^b	(2.33±0.11)E+07 ^c
	二查曼黄酮	(6.42±0.50)E+07 ^{bc}	(2.31±0.18)E+08 ^b	(5.73±0.16)E+08 ^a
维生素	泛酸酯	(1.03±0.02)E+08 ^b	(3.49±0.02)E+07 ^c	(1.90±0.05)E+08 ^a
	吡哆醇	(2.31±0.02)E+08 ^{bc}	(4.10±0.02)E+08 ^b	(2.05±0.08)E+09 ^a
	泛酸	(1.42±0.08)E+07 ^b	(6.12±0.27)E+06 ^{bc}	(4.40±0.10)E+07 ^a
有机酸	对羟基苯乳酸	(5.55±0.25)E+08 ^b	(1.13±0.28)E+09 ^a	(7.55±0.03)E+07 ^c
	DL-吡啶-3-乳酸	(3.16±0.02)E+09 ^a	(1.10±0.02)E+08 ^c	(2.90±0.15)E+09 ^{ab}
	3-脱氢莽草酸	(8.33±0.44)E+07 ^{bc}	(1.72±0.02)E+08 ^b	(1.22±0.04)E+09 ^a
	苹果酸根	(2.65±0.13)E+08 ^b	(2.99±0.21)E+08 ^a	(3.58±0.35)E+07 ^c
	D-(-)-柠草酸	(1.57±0.05)E+07 ^{bc}	(2.31±0.05)E+07 ^a	(2.34±0.09)E+07 ^{ab}
	对甲苯磺酸	(1.74±0.11)E+07 ^{bc}	(6.10±0.20)E+07 ^b	(2.74±0.10)E+07 ^a
	2-异丙基苹果酸	(6.17±0.71)E+08 ^b	(1.49±0.06)E+09 ^a	(5.25±0.68)E+08 ^{bc}
DL3-苯乳酸	(3.14±0.14)E+10 ^a	(8.78±0.57)E+09 ^c	(2.64±0.15)E+10 ^{ab}	

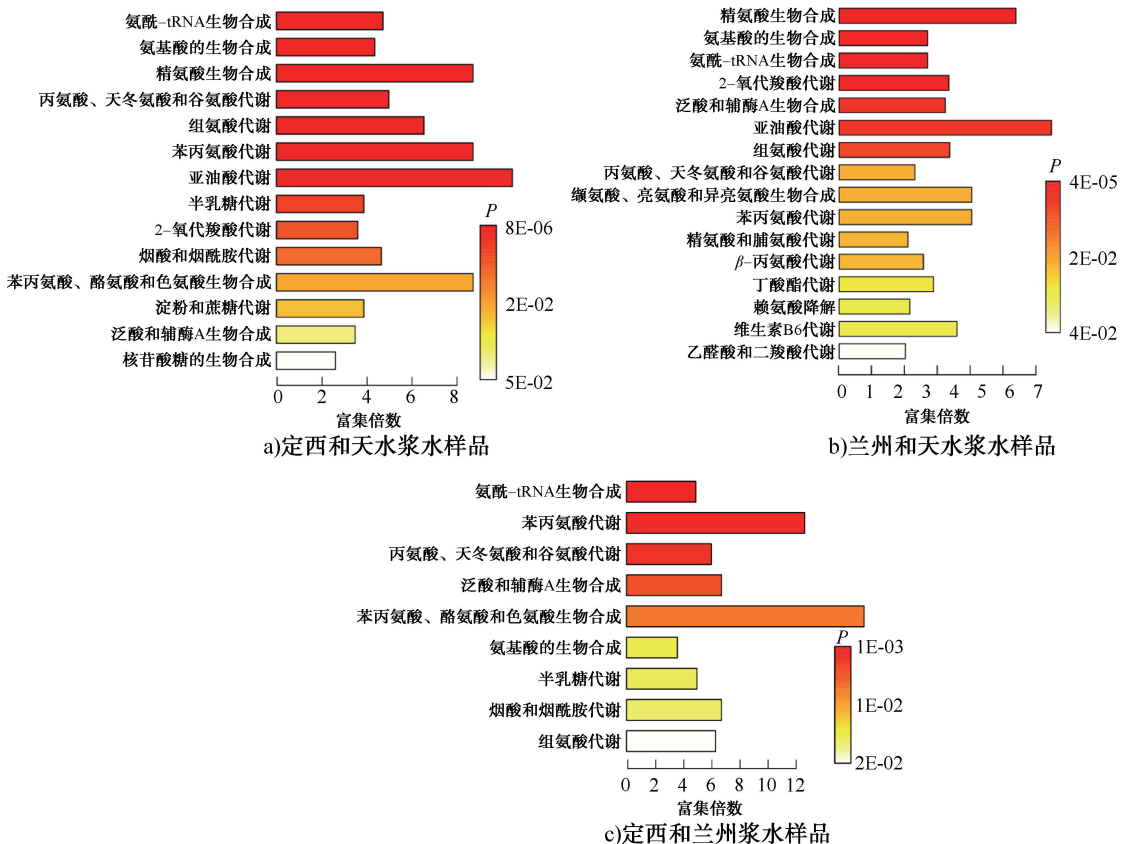


图10 ORA 富集分析图

Fig. 10 ORA enrichment analysis plots

途径中,其中,核苷酸糖的生物合成及淀粉和蔗糖代谢仅在定西和天水浆水样品的差异代谢物中注释到。精氨酸、脯氨酸、 β -丙氨酸、丁酸酯、乙醛酸、二羧酸盐和维生素 B6 代谢及赖氨酸降解仅在兰州和天水浆水样品的差异代谢物中注释到。此外,与天水浆水样品相比,定西浆水样品在亚油酸代谢通路中显著富集的差异代谢物最多,其次为精氨酸生物合成和苯丙氨酸代谢;兰州浆水样品在亚油酸代谢通路中显著富集的差异代谢物也最多,其次为精氨酸生物合成。与兰州浆水样品相比,定西浆水样品在苯丙氨酸、酪氨酸和色氨酸生物合成的代谢通路中显著富集的差异代谢物最多,其次为苯丙氨酸代谢。3 个地区浆水样品中差异代谢物均显著富集的代谢通路为丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢,是浆水中一条重要代谢途径,可能在风味与功能形成中扮演着核心角色。这些氨基酸的代谢过程与乳酸发酵等核心途径相互交织,使微生物群落结构(如优势菌属乳酸菌和酵母菌)与浆水最终风味特性紧密关联,为微生物在酸性胁迫下的持续生存与代谢活动提供保障。因此,该通路可能通过直接贡献滋味物质、提供风味前体及维持代谢稳态这 3 种方式,协同塑造浆水的独特风味与功能特性。

需要强调的是丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢这一关键代谢途径。延胡索酸可通过草酰乙酸、 α -酮戊二酸或丙酮酸进入三羧酸(TCA)循环,也可作为厌氧呼吸的末端电子受体,被还原为琥珀酸(见图 11)。延胡索酸是 TCA 循环和氨基酸代谢的关键中间产物,不仅可参与动物机体代谢、提高消化酶活性、促进营养物质吸收利用及动物生长,还可改善胃肠道微生物区系、增强机体抗应激能力和提高免疫力^[27]。综上,浆水的生理调节作用正逐步得到明确,为解析其调控肠道发育的代谢途径、增强营养物质吸收利用效率及改善营养特性的潜在机制提供了重要依据。

3 结论

本研究采用 UHPLC-MS 技术,对甘肃省定西市、兰州市和天水市这 3 个地区浆水的代谢物差异进行了系统比较,共检测到 1746 种代谢物,有机杂环化合物和有机酸及其衍生物占比较高,且不同地区浆水样品非挥发性代谢物组成具有明显的差异性。共鉴定出 568 种差异代谢物,定西和兰州浆水样品以苦味物质为主,而天水浆水样品以酸味物质

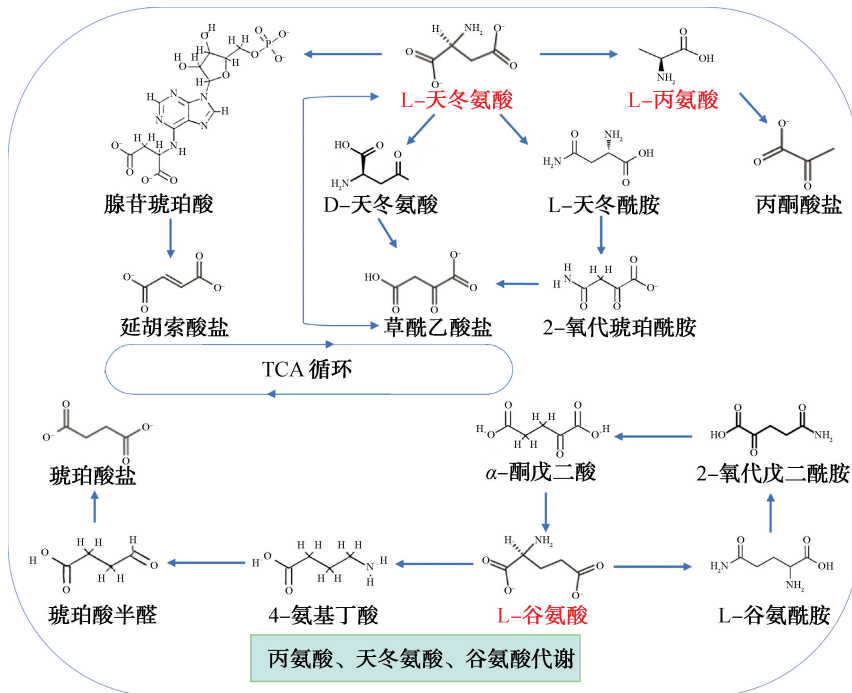


图 11 3 个地区浆水样品差异代谢物通路分析

Fig. 11 Pathway analysis of differential metabolites in Jiang-shui from three regions

为主。3个地区浆水中生物活性物质在组成和含量上的差异可能直接影响其抗氧化活性和代谢调控功能。其中,有机酸为主要生物活性物质,含量最丰富。此外,代谢通路富集分析进一步确定丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢为关键代谢途径。本研究阐明了不同地区浆水特征非挥发性风味物质的代谢差异,为实现浆水风味品质的定向改良与标准化控制提供了参考。未来将进一步探索浆水中的微生物多样性,确定浆水中非挥发性风味物质与微生物之间的关联性,以改进浆水工艺并提升其品质。

参考文献:

- [1] 吴燕. 特色自然发酵浆水中乳酸菌的筛选、表征及应用[D]. 无锡:江南大学,2019.
WU Y. Screening, characterization and application of lactic acid bacteria in characteristic natural fermented Jiangshui[D]. Wuxi:Jiangnan University,2019.
- [2] 李慧玲,王彦儒,刘亚平. 浆水菜制作及深加工研究进展[J]. 农产品加工,2020(22):82-86.
LI H L, WANG Y R, LIU Y P. Research progress on the preparation and deep processing of Jiangshui vegetable[J]. Farm Products Processing,2020(22):82-86.
- [3] ZHANG J, WU S S, ZHAO L H, et al. Culture-dependent and-independent analysis of bacterial community structure in Jiangshui, a traditional Chinese fermented vegetable food[J]. LWT-Food Science and Technology, 2018, 96: 244-250.
- [4] 刘阳. 汉中浆水发酵过程中微生物群落演替及乳酸菌筛选和基因组解析[D]. 汉中:陕西理工大学,2024.
LIU Y. Microbial community succession during fermentation of Hanzhong Jiangshui, and screening and genome analysis of lactic acid bacteria [D]. Hanzhong: Shaanxi University of Technology, 2024.
- [5] 贾雄飞. 不同蔬菜浆水营养成分分析与芹菜浆水饮料研制[D]. 杨凌:西北农林科技大学,2018.
JIA X F. Analysis of nutrient composition of different Jiangshui and development of celery Jiangshui beverage [D]. Yangling: Northwest Agriculture and Forestry University, 2018.
- [6] 温宗茂,陈葆,李杰玉,等. 发展浆水(酸菜)产业大有可为:天水市浆水(酸菜)产业发展情况调研报告[J]. 发展,2021(12):65-71.
WEN Z M, CHEN B, LI J Y, et al. There is a bright future for the development of pulp (sauerkraut) industry: A survey report on the development of pulp (sauerkraut) industry in Tianshui city [J]. Developing, 2021 (12): 65-71.
- [7] 王丽萍,李珊妮,柴春蓉,等. 传统发酵食品浆水工艺对其品质影响研究进展[J]. 湖北农业科学,2019,58(S1):7-9.
WANG L P, LI S N, CHAI C R, et al. Research progress on the effect of traditional fermented food serofluid dish technology on its quality[J]. Hubei Agricultural Sciences, 2019,58(S1):7-9.
- [8] 李宏珍,负建民,贾亚莉,等. 浆水传统酿制过程中挥发性物质的动态变化[J]. 食品与机械,2016,32(6):29-33.
LI H Z, YUN J M, JIA Y L, et al. Dynamic changes of volatile components in whey during traditional brewing processing[J]. Food and Machinery,2016,32(6):29-33.
- [9] 代安娜,丁波,张晓蒙,等. 不同工艺条件对浆水品质的影响及风味物质分析[J]. 中国食品卫生杂志,2021,33(4):497-502.
DAI A N, DING B, ZHANG X M, et al. Effect different process conditions on quality of Jiangshui and determination of flavor substances[J]. Chinese Journal of Food Hygiene, 2021,33(4):497-502.
- [10] 李多佳,负建民,姚博,等. 不同加热处理对浆水挥发性成分变化的影响[J]. 食品与发酵工业,2017,43(2):115-121.
- [11] TAN D F, MA A J, WANG S L, et al. Effects of the oxygen content and light intensity on milk photooxidation using untargeted metabolomic analysis [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2021, 69 (26): 7488-7497.
- [12] FORMISANO L, MIRAS-MORENO B, CIRIELLO M, et al. Between light and shading: Morphological, biochemical, and metabolomics insights into the influence of blue photoselective shading on vegetable seedlings[J]. Frontiers in Plant Science,2022,13:890830.
- [13] LI D J, YUN J M, YAO B, et al. Effect of different heat treatments on the volatile flavor components of Jiangshui [J]. Food and Fermentation Industries, 2017, 43 (2): 115-121.
- [14] 王芮东,李楠,卫博慧,等. 不同发酵方式萝卜泡菜中有机酸的变化分析[J]. 中国调味品,2021,46(5):139-143.
WANG R D, LI N, WEI B H, et al. Analysis of the changes of organic acids in pickled radish with different fermentation methods [J]. China Condiment, 2021, 46 (5): 139-143.
- [15] 李倩倩. 小西芹浆水发酵中的微生物与代谢物分析及其对小鼠肠道菌群的体外调节作用[D]. 西安:陕西师范大学,2018.
LI Q Q. Analysis of microorganisms and metabolites in the fermentation of celery Jiangshui and its *in vitro* regulatory effect on mouse intestinal flora [D]. Xi' an: Shaanxi Normal University, 2018.
- [16] 王益娟,周芳,焦文娟,等. 基于非靶向代谢组学的药膳鱼汤代谢产物差异分析[J]. 中国调味品,2024,49(5):148-155.
WANG Y J, ZHOU F, JIAO W J, et al. Differential

- analysis of metabolites in medicinal diet fish soup based on non-targeted metabolomics [J]. *China Condiment*, 2024,49(5):148-155.
- [17] SU Y L, LUO H L, HUANG C C, et al. Galectin-1 overexpression activates the FAK/PI3K/AKT/mTOR pathway and is correlated with upper urinary urothelial carcinoma progression and survival [J]. *Cells*, 2020, 9(4):806.
- [18] LIU D, QI Y M, ZHAO N, et al. Multivariate analysis reveals effect of glutathione-enriched inactive dry yeast on amino acids and volatile components of kiwi wine [J]. *Food Chemistry*, 2020, 329:127086.
- [19] WANG J Q, MEI S, JIN C, et al. Discovery of taste-active metabolites in *Lactobacillus plantarum*-fermented chili sauce *via* web-based computational analysis [J]. *Food Science and Human Wellness*, 2025, 14(2):9250048.
- [20] 韩鑫玉. 基于3-脱氢莽草酸单元多重响应有机荧光探针的构建及应用[D]. 曲阜:曲阜师范大学, 2023.
HAN X Y. Construction and application of organic fluorescent probes with multi-response based on 3-dehydroshikimic acid unit [D]. Qufu: Qufu Normal University, 2023.
- [21] 宁德山, 罗其昌, 陈阳, 等. 生物活性物质微胶囊化应用研究进展[J]. *食品研究与开发*, 2024, 45(14):193-200.
NING D S, LUO Q C, CHEN Y, et al. Research progress in the microencapsulation of bioactive substances [J]. *Food Research and Development*, 2024, 45(14):193-200.
- [22] SEHRAWAT R, RATHEE P, AKKOL E K, et al. Phenolic acids-versatile natural moiety with numerous biological applications[J]. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 2022, 22(18):1472-1484.
- [23] 马子甲, 张凯杰, 陆胜民, 等. 不同品种芹菜可食部分的降压活性成分及其体外血管紧张素转换酶抑制活性[J]. *浙江农业学报*, 2021, 33(12):2415-2422.
MA Z J, ZHANG K J, LU S M, et al. Antihypertensive active components in edible parts of different varieties of celeries and their *in vitro* angiotensin converting enzyme inhibitory activities[J]. *Acta Agriculturae Zhejiangensis*, 2021, 33(12):2415-2422.
- [24] 于康英, 宋绍征, 鲍红光, 等. B族维生素对抑郁症患者情绪和认知功能的影响[J]. *中国食品工业*, 2024(19):128-130.
YU K Y, SONG S Z, BAO H G, et al. Effects of B vitamins on emotional and cognitive functions of patients with depression[J]. *China Food Industry*, 2024(19):128-130.
- [25] 张哲川, 梁晓琳, 张玉双, 等. 浆水发酵过程中有机酸的变化及其抑菌性能和体外抗氧化能力[J]. *中国食品学报*, 2024, 24(4):159-169.
ZHANG Z C, LIANG X L, ZHANG Y S, et al. The changes of organic acids and its bacteriostatic properties and antioxidant capacity *in vitro* during Jiangshui fermentation [J]. *Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology*, 2024, 24(4):159-169.
- [26] 吴燕, 伏二伟, 桑学财, 等. 传统浆水中乳酸菌的筛选及抑菌性能分析[J]. *食品研究与开发*, 2019, 40(22):42-48.
WU Y, FU E W, SANG X C, et al. Isolation of lactic acid bacteria in Jiangshui celery and analysis of antimicrobial properties[J]. *Food Research and Development*, 2019, 40(22):42-48.
- [27] 龙应霞. 延胡索酸在动物体内的作用机理及应用[J]. *饲料研究*, 2020, 43(10):117-119.
LONG Y X. Mechanism of fumarate in animals and application in animals production [J]. *Feed Research*, 2020, 43(10):117-119.

Analysis of metabolite differences in Jiang-shui from different regions based on untargeted metabolomics

YANG Wendi¹, ZHANG Yafeng², WANG Yue¹, WEN Pengcheng², ZHANG Zhongming¹,
QIAO Haijun³, ZHANG Weibing¹

1. College of Food Science and Engineering, Gansu Agricultural University, Lanzhou 730070, China;

2. College of Information Science and Technology, Gansu Agricultural University, Lanzhou 730070, China;

3. College of Science, Gansu Agricultural University, Lanzhou 730070, China

Abstract: [Objective] This study aimed to investigate the metabolomic differences among Jiang-shui samples from different regions of Gansu Province. **[Methods]** Jiang-shui samples collected from Dingxi, Lanzhou, and Tianshui in Gansu Province were subjected to non-targeted metabolomics analysis using ultra-high performance liquid chromatography coupled with Orbitrap Exploris™ 480 high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Orbitrap Exploris™ 480 MS) combined with multivariate statistical analysis. **[Results]** A total of 1746 metabolites were detected in the Jiang-shui samples from the three regions, with 1107 and 639 metabolites identified in positive and negative ion modes, respectively. These included 219 lipids and lipid-like molecules, 96 phenylpropanoids and

(下转第75页)

WBDF was subjected to carboxymethylation modification, and its physicochemical properties, functional properties, and structural characteristics pre-and post-modification were compared and analyzed. **【 Results 】** Carboxymethylated wheat bran dietary fiber (CWBDF) with a degree of substitution of 0.16 was successfully prepared, and its soluble dietary fiber content increased from 3.31% to 20.76%. The water-holding capacity, oil-holding capacity, and swelling capacity increased to 1.81, 1.31, and 1.30 times those of the unmodified WBDF, respectively. The glucose adsorption capacity reached up to 2.18 times that of the unmodified WBDF. The cholesterol adsorption capacity was significantly enhanced and exhibited good pH independence. The DPPH and ABTS⁺ radical scavenging rates were 1.33 and 1.53 times those of the unmodified WBDF, respectively. The total phenol content increased to 1.74 times that of the unmodified WBDF. Structural analysis revealed that cellulose and hemicellulose in CWBDF were degraded, the crystalline region was destroyed, and a loose porous structure with increased specific surface area was formed. **【 Conclusion 】** Carboxymethylation modification significantly increased the soluble dietary fiber content in WBDF and proved to be an effective approach to modifying its physical structure and enhancing its processing and functional properties.

Key words: carboxymethylation modification; wheat bran dietary fiber; physicochemical property; functional property; structural characteristic

[责任编辑:杨晓娟 申慧珊]

(上接第 53 页)

polyketides, 446 organic heterocyclic compounds, 360 organic acids and derivatives, 284 benzenoids, 183 organic oxygen compounds, 49 organic nitrogen compounds, and 5 organic sulfur compounds. The Tianshui samples showed significant differences from those of the other two regions, whereas the Dingxi and Lanzhou samples exhibited certain similarities. Orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) with $VIP > 1$ and $P < 0.05$ identified 568 differential metabolites, including 36 taste-related metabolites. Among them, sour and bitter substances were the main contributors to the taste of Jiang-shui; sour substances were predominantly accumulated in Tianshui samples, while bitter substances were mainly concentrated in Lanzhou samples. Among the 21 bioactive substances identified, phenolic acids and organic acids were relatively abundant. Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG) annotation revealed that the alanine, aspartate and glutamate metabolism pathway was significantly enriched among the differential metabolites from the three regions. **【 Conclusion 】** The Jiang-shui samples from different regions exhibited significant differences in metabolite composition, abundance, and metabolic pathways. These findings provide a reference for further understanding the quality formation mechanism of Gansu Jiang-shui.

Key words: Jiang-shui; non-targeted metabolomics; differential metabolite; biologically active substance; metabolic pathway

[责任编辑:杨晓娟]