

# 提升農藥殘留檢測效率：自動化質譜數據分析技術之探討

汪淋楊<sup>1</sup>、莊瑋臻<sup>1</sup>、徐慈鴻<sup>1</sup>、林韶凱<sup>1\*</sup>

## 摘要

汪淋楊、莊瑋臻、徐慈鴻、林韶凱。2025。提升農藥殘留檢測效率：自動化質譜數據分析技術之探討。臺灣農藥科學 18 : 17-32。

本研究主要是探討自動化質譜數據分析技術在農藥殘留檢測中的應用，並比較其與傳統人工分析的效率及準確性。本研究採用 QuEChERS 樣品前處理方法，結合液相層析串聯質譜儀 (LC-MS/MS) 及氣相層析串聯質譜儀 (GC-MS/MS) 進行農藥多重殘留檢測的原始質譜數據的製備工作，並且研發特徵波峰自動偵測比對模組、基質匹配檢量線自動產製模組及雲端自動化分析資訊平台，以實現從數據收集到分析結果產出的全自動化檢驗流程。研究結果顯示，自動化數據分析時間從人工方式的 240 分鐘縮短至 10 分鐘，效率提升超過 20 倍，自動化技術顯著提升了檢測效率。在藥劑回收率測試中，本研究選用了小白菜、蘋果、小麥及烏龍茶四種代表性基質並添加 15 項品質管制 (QC) 藥劑，研究結果顯示，自動化分析與人工分析在所有基質的藥劑回收率均無顯著差異。自動化質譜數據分析技術的應用不僅能有效提升農藥殘留檢測效率，還具備良好的準確性與適應性，未來更具有拓展至動物用藥、醫藥、食品添加劑及重金屬等質譜檢測的潛力。

**關鍵詞：**農藥殘留、質譜數據、自動化分析、檢測效率、雲端主機

---

接受日期：2025 年 4 月 1 日

\* 通訊作者。E-mail: sklin@acri.gov.tw

<sup>1</sup> 臺中市 農業部農業藥物試驗所

## 前言

農藥殘留會以多種方式影響人體的健康，儘管目前發生急性農藥中毒事件的頻率有所下降，但是長期接觸低濃度農藥所導致的慢性毒性表現有時候在晚期才會顯現，農藥會破壞細胞穩定狀態而造成 DNA 損傷、酶功能障礙或粒線體形態的改變，因而引發一些慢性疾病：包括免疫系統或神經系統損傷、癌症、生殖問題、哮喘及先天性缺陷<sup>(4)</sup>。雖然農藥對人體健康有上述的影響，但是農藥在現代農業中仍然發揮著至關重要的任務，農藥可以保護農作物免受病蟲害和雜草的侵害，提高農業生產力以確保糧食安全，還有許多國家對食品中的農藥殘留有嚴格的規定，生產符合國際安全標準的食品才可以提高出口量及競爭力，因此必須透過監測及分析食品中的農藥殘留狀況以保護消費者健康及促進國際貿易的進行<sup>(5)</sup>。

農藥殘留檢測相關技術包含適合揮發性和半揮發性農藥檢測的氣相層析法 (GC)<sup>(7)</sup>、適用於檢測不易揮發農藥的液相層析法 (LC)<sup>(8)</sup>、通常與層析法結合使用的質譜法 (MS)<sup>(9)</sup>、利用抗體特異性來檢測農藥殘留的酵素結合免疫吸附分析法 (ELISA)<sup>(10)</sup> 以及能夠在現場快速檢測的 UV-VIS 和拉曼光譜等技術<sup>(9)</sup>。其中層析法串聯質譜法 (例如 LC-MS 和 GC-MS) 因其具有高度的靈敏度和選擇性，因此被廣泛地應用於農藥殘留檢測<sup>(3)</sup>，此外，搭

配使用 QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, Safe) 程序取代傳統的樣品製備方法，使我們能夠同時分析樣品中的數百項農藥<sup>(2)</sup>。儘管質譜技術的檢測結果雖然可靠，但是它們的實際應用卻受到初期昂貴的建置成本、操作流程的複雜性及數據分析耗時<sup>(9)</sup>，以及需要專業有經驗的技術人員操作實施等因素所影響。從研究中發現自動化分析技術在農藥殘留檢測中具有極大的需求和潛力，特別是在世界各地的高通量實驗室中，自動化顯著提高了數據品質和可追溯性<sup>(7)</sup>，其中質譜數據分析通常需要大量的人工操作，例如識別波峰、積分和定量，自動化數據分析可以減少這些操作，從而降低分析成本和人為誤差<sup>(11)</sup>，另外農藥殘留檢測通常需要高通量分析方法來處理大量的樣品，自動化質譜數據分析技術可以顯著加快數據處理速度，從而提高分析通量<sup>(6)</sup>。

本研究主要探討自動化質譜數據分析技術於農藥殘留檢測中的應用及其效能，第一，介紹自動化質譜數據分析技術的核心模組，這些程式模組的運行原理與機制；第二，通過實驗比較人工方式與自動化分析在檢測效率以及不同基質中品質管制藥劑回收率。研究成果顯示自動化質譜數據分析技術不僅能顯著提升農藥殘留檢測效率，將數據分析所需時間從人工操作的 240 分鐘縮短至 10 分鐘以內，同時還具備與人工分析相近的準確度。透過特徵波峰自動偵測比對模組及基質匹配檢量線自動產製模組，以及完整的雲端資訊平

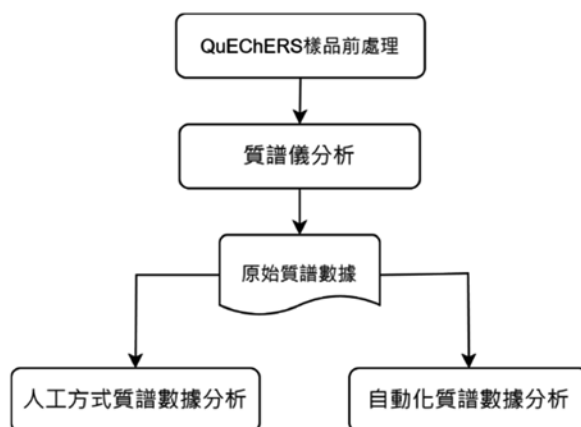
台，本研究展示了結合化學質譜分析、數據科學及自動化技術的創新應用框架，不僅拓展了學術界對現代檢測技術的理解，更為檢驗機構或實驗室提供了快速準確的檢測解決方案。

## 研究方法

### 一、製備原始質譜數據

本研究之檢驗方法係採用我國衛生福利部食品藥物管理署公告之「食品中殘留農藥檢驗方法－多重殘留分析方法(五)」(2023年1月1日修正，MOHWP0055.05)<sup>(1)</sup>，樣品以 QuEChERS 方法 (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, Safe) 進行前處理後，再以液相層析串聯質譜儀 (liquid chromatograph/tandem mass spectrometer, LC-MS/MS) 及氣相層析串聯質譜儀 (gas

chromatograph/tandem mass spectrometer, GC-MS/MS) 分析，此方法適用於蔬果類、穀類、乾豆類、茶類、香辛植物及其他草本植物等食品中阿巴汀 (abamectin) 等 410 項農藥多重殘留分析。本研究選用之實驗樣品為小白菜、蘋果、小麥及烏龍茶，分別代表蔬菜、水果、穀類及茶葉等四種不同基質，每種基質均包含 7 劑溶劑、1 劑標準品、1 劑 Check、7 劑檢量點、2 劑查核點、1 劑 Blank、1 劑品管檢液、1 劑重複檢液、1 劑待檢測樣品等 22 劑樣品，使用的液相層析串聯質譜儀及氣相層析串聯質譜儀型號分別為 Agilent LCMS-7000C 及 Agilent GCMS-6470，經過上述樣品前處理及質譜儀分析過程後，於串接質譜儀之電腦硬碟目錄產出原始質譜數據 (圖一)，產出之原始質譜數據可供後續人工分析及自動化分析兩種方法使用。



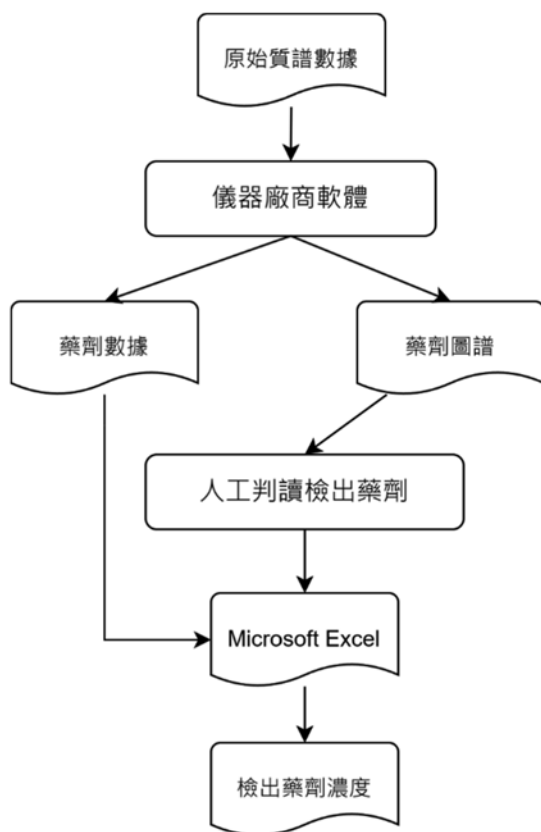
圖一、使用 QuEChERS 及質譜儀產製原始質譜數據的流程。

**Fig. 1.** Procedure used to (1) produce raw mass spectrometry data using QuEChERS and (2) analyze this data using mass spectrometry methods.

## 二、人工方式分析原始質譜數據

以人工方式操作液相層析串聯質譜儀 Agilent LCMS-7000C 及氣相層析串聯質譜儀 Agilent GCMS-6470 儀器廠商提供之分析軟體，解讀樣品原始質譜數據以產生儀器數據及圖譜，以肉眼方式查看比對查核點與待測樣品（指查核點外的其他樣品）的 410 項藥劑圖譜判讀某項藥劑是否檢出，必要時手動調整基線（baseline）以獲

取更精準的特徵波峰相關數值，將待測樣品檢出之藥劑特徵波峰相關數據如定量離子與定性離子的滯留時間（retention time）、波峰面積（peak area）及訊號雜訊比（signal-to-noise ratio），連同檢出藥劑相關之檢量點樣品儀器數據，一同複製張貼於 Microsoft Excel 工作表中，以檢量點波峰面積對濃度作圖繪製基質匹配檢量線（matrix calibration curve），並帶入檢出藥劑之波峰面積以計算濃度（圖二）。



圖二、以人工方式進行原始質譜數據分析的流程。

Fig. 2. Procedure used for the manual analysis of raw mass spectrometry data.

### 三、原始質譜數據自動化分析

#### (一)特徵波峰自動偵測比對模組

本研究使用本所研發之特徵波峰自動偵測比對模組，針對質譜儀所產出的原始質譜數據進行分析，首先解讀查核點原始質譜數據並獲取 410 項藥劑所有離子對的訊號，以橫軸為滯留時間 (retention time) 及縱軸為訊號強度 (intensity) 繪製離子對的連續折線圖譜，自動偵測圖譜中特徵波峰 (signal peak) 的滯留時間及訊號強度，自動拉取特徵波峰下方的基線並使用梯形公式 (trapezoidal rule) 計算特徵波峰面積，計算特徵波峰的訊號雜訊比，以特徵波峰定量離子及定性離子的波峰面積計算相對離子強度 (ratio)。以同樣方式解讀待測樣品 (指查核點外的其他樣品) 的原始質譜數據以獲取其連續折線圖譜，以查核點特徵波峰為基準，比對待測樣品圖譜中所有波峰以獲取其特徵波峰，並以同樣方式取得特徵波峰的滯留時間、訊號強度、波峰面積、訊號雜訊比及相對離子強度，待測樣品此時取得的特徵波峰尚不是最終特徵波峰，需再經過篩選條件：第一、定量離子訊號雜訊比  $\geq 10$  且定性離子訊號雜訊比  $\geq 2$ ；第二、相對離子強度落在查核點相對離子強度的 50-150%，通過上述條件後才可為合格特徵波峰，偵測比對共有三種結果 (圖三)：(a) 待測樣品於查核點特徵波峰相近位置無波峰 (b) 待測樣品特徵波峰經過條件篩選後判定為非合格特徵波峰 (c) 待

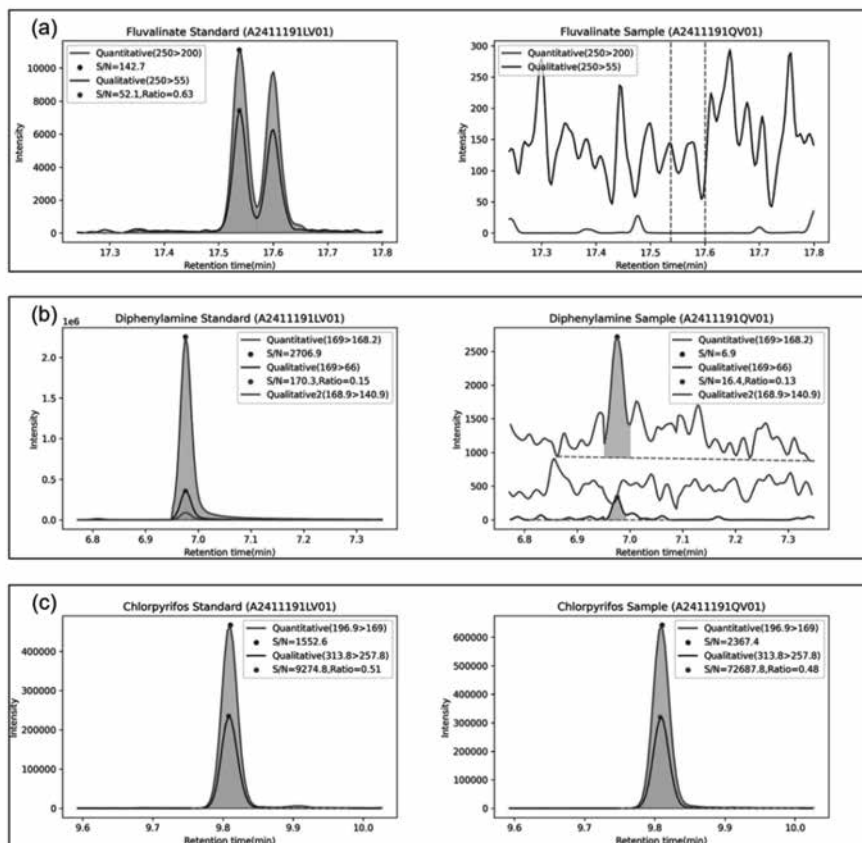
測樣品特徵波峰經過條件篩選後判定為合格特徵波峰，目前模組可以分析的原始數據格式包含 AB Sciex(.wiff)、Agilent(.D)、Shimadzu(.lcd) 及 Waters(.raw) 等市場上主流質譜儀品牌。

#### (二)基質匹配檢量線自動產製模組

本研究進一步使用本所研發之基質匹配檢量線自動產製模組，該模組同樣是以 Python 程式撰寫的程式模組，自動化讀取由特徵波峰自動偵測比對模組所產製之 7 份檢量點特徵峰定量面積，利用透過線性回歸 (linear regression) 模式自動繪製檢量線 ( $y = ax + b$ )，程式模組可自動刪除偏離值過大之檢量點，以產出符合確效規範 (決定系數  $R^2 > 0.99$ ) 的基質匹配檢量線 (圖四)，並自動帶入檢出藥劑之波峰定量面積計算最終檢出濃度。

#### (三)質譜數據自動化分析資訊平台

為了驗證質譜數據分析全自動化是否可有效提升農藥殘留檢驗效率工作，本研究進一步開發了一套質譜數據自動化分析資訊平台 (圖五)，檢驗人員將 QuEChERS 方法前處理後的樣品上機後，質譜數據自動化分析資訊平台即可自動接手後續的質譜數據分析工作。質譜數據自動化分析資訊平台首先提供一套原始質譜數據收集程式，該收集程式安裝於連接 Agilent LCMS-7000C 及 Agilent GCMS-6470 質譜

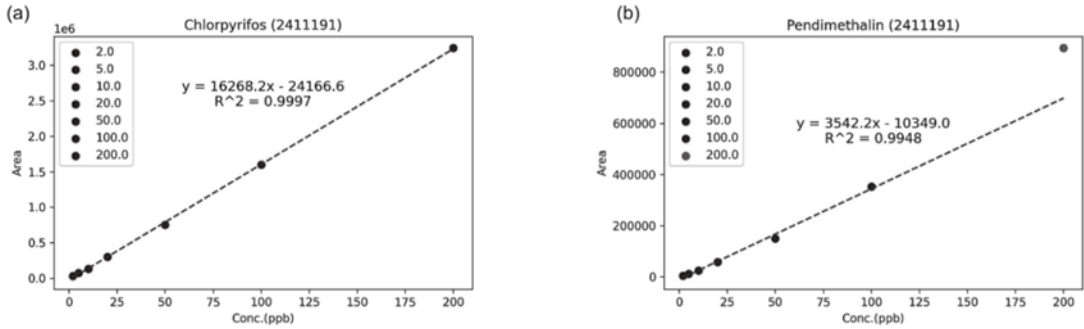


圖三、待測樣品與查核點自動偵測比對結果 (a) 相對位置無對應的特徵波峰 (b) 特徵波峰未符合篩選條件 (c) 特徵波峰符合篩選條件。

**Fig. 3.** Auto-detection results of comparisons between samples and checkpoints showed (a) no corresponding signal peaks at relative positions, (b) signal peaks that do not meet filtering conditions, and (c) signal peaks that meet filtering conditions.

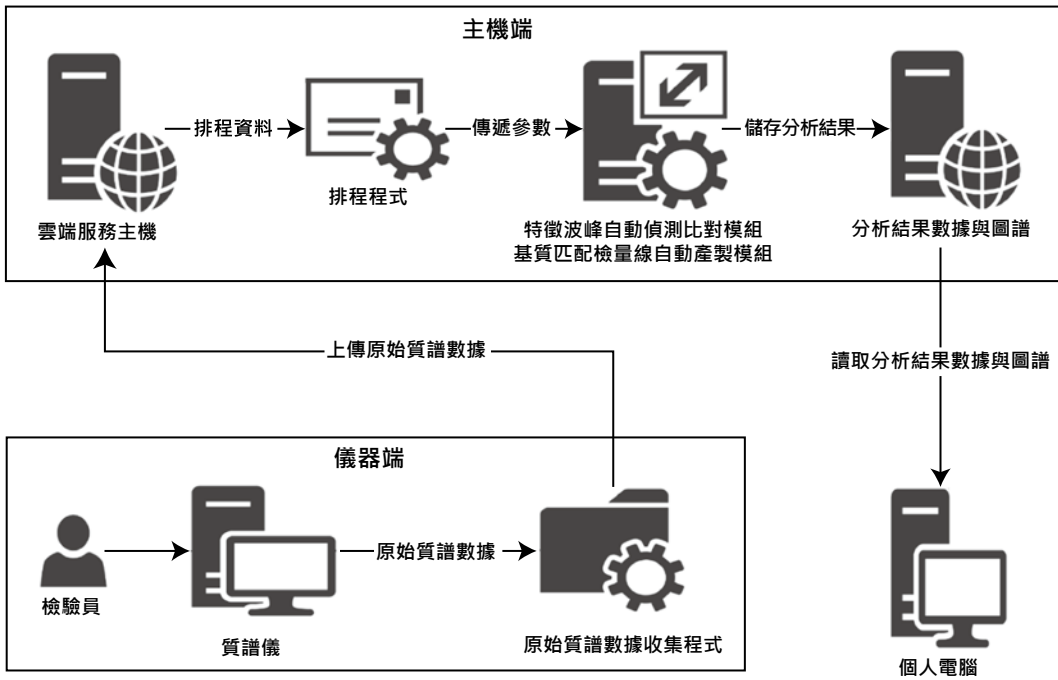
儀之電腦，收集程式可自動偵測原始質譜數據產生之電腦目錄位置，主動收集、壓縮及上傳原始質譜數據至雲端服務主機，雲端服務主機的排程程式接收來自不同質譜儀電腦所上傳的原始質譜數據，排程程式呼叫特徵波峰自動偵測比對模組進行原始質譜數據解析，特徵波峰自動偵測比對

模組安裝於主機端中的 Python 3.9.7 虛擬環境，該模組無法獨立運作，必須由主機中的排程程式呼叫而啟動，排程程式呼叫時以參數告知特徵波峰自動偵測比對模組此時要分析的客戶資訊及原始數據放置路徑，特徵波峰自動偵測比對模組主動抓取原始數據進行分析並產出檢量線及待測樣



圖四、基質匹配檢量線自動產製模組繪製之結果圖片 (a) 不需排除任何檢量點 (b) 排除 200 (parts per billion, ppb) 檢量點。

Fig. 4. Diagrams plotted by the matrix calibration curve automatic production module that (a) do not need to exclude any measurement points, and (b) exclude the 200 ppb measurement point.



圖五、質譜數據自動化分析資訊平台架構圖。

Fig. 5. Architecture diagram illustrating the information platform created for the automated analysis of mass spectrometry data.

品定量面積。基質匹配檢量線自動產製模組接續啟動，以特徵波峰自動偵測比對模組計算出的檢量線及待測樣品定量面積為基礎，計算出樣品 410 項藥劑的檢量線數據，並代入待測樣品藥劑定量面積以計算出待測樣品藥劑濃度，上述 2 個程式模組運行所產製的樣品分析結果數據及圖譜存放於雲端服務主機資料庫及硬碟，資訊平台同時提供網頁功能供使用者可透過個人電腦瀏覽器查詢樣品分析結果數據及圖譜。

#### (四)樣品檢測時間分析方法

本研究主要比較人工及自動化分析原始質譜數據所需的檢測時間，以及兩者所計算出的藥劑回收率差異性，量測檢測時間使用的樣品數量一批 22 劑樣品：包含 7 劑溶劑、1 劑儀器管制表、1 劑 Check、7 劑檢量點、2 劑查核點、1 劑 Blank、1 劑品管檢液、1 劑重複檢液、1 劑待檢測樣品，在人工分析方面，量測檢驗員手動操作質譜儀軟體比對藥劑圖譜，確認每項藥劑的特徵波峰位置，包括特徵波峰基線調整、以及使用 Microsoft Excel 軟體進行基質匹配檢量線產製，及最終藥劑濃度計算完成所需的時間；在自動化分析方面，量測質譜數據自動化分析資訊平台從自動上傳樣品原始質譜數據到產生分析結果與圖譜可供使用者查看所需的時間。

#### (五)品質管制藥劑回收率分析方法

為了比較人工及自動化分析所計算出的藥劑回收率差異性，使用小白菜、蘋果、小麥及烏龍茶等四種基質，並且於品管檢液中添加亞滅培 (acetamiprid)、亞托敏 (azoxystrobin)、白克列 (boscalid)、加保利 (carbaryl)、陶斯松 (chlorpyrifos)、大利松 (diazinon)、芬普尼 (fipronil)、氟速芬 (fluensulfone)、氟比來 (fluopicolide)、克收欣 (kresoxim-methyl)、撲滅寧 (procymidone)、普快淨 (proquinazid)、畢達本 (pyridaben)、得芬瑞 (tebufenpyrad)、四克利 (tetraconazole) 等 15 項濃度為 0.1  $\mu\text{g/g}$  的品質管制 (QC) 藥劑，計算上述藥劑的回收率。統計分析方面使用成對樣品  $t$  檢定分析四種基質於人工方式質譜數據分析與自動化質譜數據分析，原假設 ( $H_0$ ) 是人工方式與自動分析的準確率相等，而對立假設 ( $H_1$ ) 是人工方式與自動分析的準確率不相等，目標是檢驗兩者之間是否存在顯著差異，而不是判斷某一方法是否比另一方法更高或更低，因此使用雙尾檢驗且  $\alpha$  顯著性水準設定為 0.05 對是否有差異進行檢驗。

$$t = \frac{\bar{d}}{s_d/\sqrt{n}}$$

- $\bar{d}$  是配對差異的平均值。
- $s_d$  是差異的標準差。
- $n$  是配對數據的數量。
- $s_d/\sqrt{n}$  是差異平均值的標準誤差。

## 結果與討論

本研究比較了人工與自動化質譜數據分析方法在檢測農藥殘留方面的表現，主要著重於檢測時間及品管藥劑回收率的差異，使用的樣本包括小白菜、蘋果、小麥及烏龍茶等，代表四種不同類型的食品基質來進行 15 項品管藥劑回收率測試，實驗的結果顯示自動化分析方法在檢測效率表現出顯著優勢且回收率測試與人工方式有一致性的結果，具體探討如下：

### 一、樣品數據分析時間比較

在樣品檢測效率方面，本研究特別比較了人工方式與使用質譜數據自動化分析資訊平台協助處理農藥殘留數據流程上所需的時間（表一），使用人工方式分析時，檢驗員需手動使用儀器軟體解讀質譜數據、手動調整基線、並使用 Microsoft Excel 進行基質匹配檢量線的產製及最終濃度計算，約需耗時 240 分鐘左右，而使用自動化質譜數據分析技術，整個流程由資訊平台自動完成，從原始質譜數據上傳

至雲端平台到結果產出僅需 10 分鐘左右。此效率的提升主要得益於本所自行研發之特徵波峰自動化偵測比對模組、基質匹配檢量線自動產製模組以及質譜數據自動化分析資訊平台，這些模組能夠在無人工干預的情況下自動化地完成高效率、高精度的分析工作，原本需以肉眼方式比對標準品與樣品的 410 項藥劑的波峰數量、位置及形狀，以及檢核離子訊號雜訊比及相對離子強度，現在透過自動化特徵波峰自動化偵測比對模組，不僅減少了人為操作誤差的可能性，同時也顯著縮短了檢測時間，大幅提高了整體檢測效率。

### 二、品質管制藥劑回收率比較

本研究採用成對樣本 t 檢定及雙尾檢驗分析小白菜（表二）、蘋果（表三）、小麥（表四）及、烏龍茶（表五）四種不同基質的 15 項品質管制藥劑回收率數據，首先在自由度  $df=14$  和  $\alpha/2=0.025$  的情況下 t 分布表中的臨界值為 2.1448，小白菜的差異平均值為 0.39、差異標準差為 1.31、t 統計量為 1.1368，蘋果的差異平均值為

表一、人工方式與自動化質譜數據分析的檢測時間比較

**Table 1.** Comparison of detection times required for manual and automated mass spectrometry data analyses

比較項目	人工方式 (分鐘)	自動化 (分鐘)
比對樣品藥劑圖譜	120	6
產製基質匹配檢量線	60	2
計算檢出藥劑濃度	60	2
合計	240	10

表二、小白菜於人工方式與自動化分析的品管藥劑回收率

Table 2. Comparison of QC recovery rates in manual and automated analyses of Chinese cabbage

QC	Manual (%)	Automated (%)	Different (%)
acetamiprid	127.1	127.1	0
azoxystrobin	127.3	127.2	0.1
boscalid	117.3	117.1	0.2
carbaryl	121.3	121.3	0
chlorpyrifos	81.8	79.6	2.2
diazinon	90.6	90.4	0.2
fipronil	100.8	100.9	0.1
fluensulfone	100.3	100.5	0.2
fluopicolide	108.6	108.4	0.2
kresoxim-methyl	98.4	97.4	1
procymidone	95.1	97.0	1.9
proquinazid	80.8	80.8	0
pyridaben	103.4	103.4	0
tebufenpyrad	100.2	100.2	0
tetraconazole	90.6	86.5	4.1

表三、蘋果於人工方式與自動化分析的品管藥劑回收率比較

Table 3. Comparison of QC recovery rates in manual and automated analyses of apple

QC	Manual (%)	Automated (%)	Different (%)
acetamiprid	117.0	117.1	0.1
azoxystrobin	100.5	101.1	0.6
boscalid	101.6	102.3	0.7
carbaryl	98.2	98.4	0.2
chlorpyrifos	91.1	88.0	3.1
diazinon	87.5	87.7	0.2
fipronil	101.2	101.9	0.7
fluensulfone	87.9	87	0.9
fluopicolide	98.9	99.1	0.2
kresoxim-methyl	100.1	98.4	1.7
procymidone	96.3	93.8	2.5
proquinazid	95.9	94.8	1.1
pyridaben	97.9	97.2	0.7
tebufenpyrad	96.5	95.2	1.3
tetraconazole	86.8	86.8	0

表四、小麥於人工方式與自動化分析的品管藥劑回收率比較

Table 4. Comparison of QC recovery rates in manual and automated analyses of wheat

QC	Manual (%)	Automated (%)	Different (%)
acetamiprid	121.5	121.5	0
azoxystrobin	93.9	94.4	0.5
boscalid	102.8	104.1	1.3
carbaryl	94.6	94.9	0.3
chlorpyrifos	93.4	93.6	0.2
diazinon	88.1	88.1	0
fipronil	96.4	97.0	0.6
fluensulfone	91.9	91.9	0
fluopicolide	91.8	92.9	1.1
kresoxim-methyl	100.8	101.7	0.9
procymidone	91.1	89.0	2.1
proquinazid	86.5	86.3	0.2
pyridaben	92.1	92.1	0
tebufenpyrad	92.0	92.0	0
tetraconazole	90.7	92.0	1.3

表五、烏龍茶於人工方式與自動化分析的品管藥劑回收率比較

Table 5. Comparison of QC recovery rates in manual and automated analyses of oolong tea

QC	Manual (%)	Automated (%)	Different (%)
acetamiprid	112.9	116.2	3.3
azoxystrobin	103.8	108.7	4.9
boscalid	110.8	112.3	1.5
carbaryl	99.5	100.3	0.8
chlorpyrifos	86.3	83.9	2.4
diazinon	92.0	92.0	0
fipronil	106.0	106.3	0.3
fluensulfone	102.2	102.7	0.5
fluopicolide	106.2	107.3	1.1
kresoxim-methyl	106.0	106.1	0.1
procymidone	97.8	96.5	1.3
proquinazid	82.9	82.6	0.3
pyridaben	90.4	90.3	0.1
tebufenpyrad	99.0	98.2	0.8
tetraconazole	100.6	96.6	4

0.57、差異標準差為 1.18、t 統計量為 1.8820，小麥的差異平均值為 0.26、差異標準差為 0.83、t 統計量為 1.2176，烏龍茶的差異平均值為 0.24、差異標準差為 2.12、t 統計量為 0.4393，四種基質的 t 統計量皆小於臨界值 2.1448，表示以人工方式及自動化方式分析質譜數據所得到的四種基質品質管制回收率沒有差異，並且在具有複雜化學組成的基質（如烏龍茶）中，自動化分析結果仍有高度穩定性和精確度，表示自動化質譜數據分析適用於多種類型基質的農藥殘留檢測。

### 三、質譜數據自動化分析技術未來的應用潛力

自動化質譜數據分析技術對於多重農藥殘留檢測的效率提升及檢測準確度在本研究中已獲得驗證，尤其在需要快速、精確地處理大量樣品的情境中，自動化分析技術提供了一個有效解決方案，透過自動化質譜數據分析資訊平台的應用，原始質譜數據可自動上傳至雲端，並通過自動化分析程式模組解析與計算，最終結果可供檢驗人員透過網頁查詢，極大地縮短了數據處理及結果產出的時間。此外，在一些需要手動調整基線以獲取更準確數據的情境中，自動化模組也表現出與人工相當的準確度，針對不同基質及不同品質管制藥劑，自動化系統能夠精確檢出藥劑濃度，與人工檢測的回收率數據以統計分析比較，顯示兩者之間並無差異。未來，隨著

自動化技術的持續改進，此一自動化質譜數據分析技術有潛力應用於更多不同類型的食品基質，以及擴展至其他種類的質譜檢測工作，例如動物用藥、醫藥、食品添加劑、重金屬和其他污染物等領域，從而進一步提升整體食品、環境及醫藥安全監測的效率和準確性。

### 結論

本研究主要目的是在探討自動化質譜數據分析技術在提升農藥殘留檢測效率方面的應用潛力以及驗證其在藥劑濃度計算的準確度，經過本研究結果顯示，首先，相較於傳統的人工檢測方法，自動化技術在質譜數據分析速度方面展現出顯著的優勢，尤其透過自動化質譜數據分析平台，顯著縮短了樣品數據處理的時間，從傳統人工分析所需的 240 分鐘減少至僅 10 分鐘，顯示出明顯的時間效率提升。其次，成對樣本 t 檢定的結果顯示，在品質管制藥劑的回收率方面，人工分析與自動化分析之間並無顯著差異，這證實了自動化技術在準確度上能夠達到與人工分析相同的標準。在針對包括小白菜、蘋果、小麥及烏龍茶等不同基質類型的測試中，自動化質譜數據分析系統平台在面對複雜化學組成（如烏龍茶）的情境下，仍能保持與傳統人工方法相當的準確性與穩定性，進一步證實了該系統在多種食品基質中應用的可行性與可靠性，不僅提升了農藥殘留檢測的效率，還顯著降低了人為操作誤差的

可能性。特別是在需要迅速處理大量樣品的環境中，自動化技術展現了其無可替代的優勢。隨著自動化技術的持續進步，自動化質譜數據分析技術未來有望擴展至更為廣泛的應用領域，這些應用不僅限於農藥殘留的檢測，還可涵蓋動物用藥、醫藥、食品添加劑及重金屬等多種污染物的檢測工作，並且將顯著提升食品安全、環境監測及醫藥安全的效率與準確性。雖然，本研究證實了自動化質譜數據分析技術在農藥殘留檢測中的應用價值，為其在食品安全監測中的廣泛應用奠定了堅實的基礎。然而本研究所使用質譜數據自動化分析資訊平台仍然有需要改進與優化的地方，某些檢驗實驗室的網路環境為封閉狀態而無法連接本所的雲端主機，或是其檢驗客戶的樣品所產生的原始數據，因數據安全的考量而無法上傳到本所雲端主機進行分析，未來研究重點應著重在是否同步開發單機版，讓某些因法規或實務上無法上傳樣品原始質譜數據的用戶可以使用，另外包括特徵波峰偵測比對技術的改進以解決更多不同類型基質或藥劑所造成的複雜圖譜，以及升級雲端主機硬體規格以應付大量使用者同步上傳分析樣品所需的量能，以便讓該技術應用更為普及。

## 謝辭

本研究承蒙農業部 2024 年度「農藥殘留快速檢驗與人工智慧技術躍升計畫」(113 農科-11.3.1-農-02) 計畫經費補助及

本所殘留管制組檢驗方法研究室同仁協助相關試驗工作，謹此謝忱。

## 引用文獻

1. 衛生福利部。2022。食品中殘留農藥檢驗方法-多重殘留分析方法(五)。衛授食字第 1111901537 號。
2. Hernández-Mesa, M., and Moreno-Gonzalez, D. 2022. Current role of mass spectrometry in the determination of pesticide residues in food. *Separations* 9: 148.
3. Manggala, B., Chaichana, C., Syahputra, W. N. H., and Wongwilai, W. 2023. Pesticide residues detection in agricultural products. *Nat. Life Sci. Commun.* 22: e2023049.
4. Munir, S., Azeem, A., Zaman, M. S., and Zia Ul Haq, M. 2024. From field to table: Ensuring food safety by reducing pesticide residues in food. *Sci. Total Environ.* 922: 171382.
5. Radowan, A. A. 2024. Analytical techniques for determining pesticide residues in food: A comprehensive review. *Int. J. Mater. Technol. Innov.* 4: 42-74.
6. Salvagno, G. L., Danese, E., and Lippi, G. 2020. Mass spectrometry and total laboratory automation: Opportunities and drawbacks. *Clin. Chem. Lab. Med.* 58: 994-1001.

7. Sindhu, S., and Manickavasagan, A. 2023. Nondestructive testing methods for pesticide residue in food commodities: A review. *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* 22: 1226-1256.
8. Narendaran, S. T., Meyyanathan, S. N., and Babu, B. 2020. Review of pesticide residue analysis in fruits and vegetables. Pre-treatment, extraction and detection techniques. *Food Res. Int.* 133: 109141.
9. Xu, L., Abd El-Aty, A. M., Eun, J. B., Shim, J. H., Zhao, J., Lei, X., Gao, S., She, Y., Jin, F., Wang, J., Jin, M., and Hammock, B. D. 2022. Recent advances in rapid detection techniques for pesticide residue: A review. *J. Agric. Food Chem.* 70: 13093-13117.
10. Yura, W., Muhammad, F. R., Mirza, F. F., Maurend, Y. L., Widyanoro, W., Farida, S. S., Aziz, Y. P., Desti, A., Edy, W., Septy, M., Sutra, D., Alifia, I. B., Nanda, I. V. M., and Fikri, E. 2021. Pesticide residues in food and potential risk of health problems : A systematic literature review. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science.* 894: 012025.
11. Zhang, Y. V., and Rockwood, A. 2015. Impact of automation on mass spectrometry. *Clin. Chim. Acta* 450: 298-303.

# Enhancing the Efficiency of Pesticide Residue Detection: An Exploration of Automated Mass Spectrometry Data Analysis Techniques.

Ling-Yang Wang<sup>1</sup>, Wei-Chen Chuang<sup>1</sup>, Tsyrr-Horng Shyu<sup>1</sup>, Shao-Kai Lin<sup>1\*</sup>

## Abstract

Wang, L. Y., Chuang, W. C., Shyu, T. H., and Lin, S. K. 2025. Enhancing the efficiency of pesticide residue detection: An exploration of automated mass spectrometry data analysis techniques. *Taiwan Pestic. Sci.* 18: 17-32.

Pesticide residues can cause significant impacts on human health, such as immune damage, cancer, and reproductive problems; however, pesticides are crucial in improving agricultural productivity and ensuring food safety. Monitoring pesticide residues in food not only protects consumer health, but also ensures that food products comply with international safety standards and enhances the competitiveness of exports and the market. Therefore, there is an increasing demand for efficient pesticide residue detection technologies in numerous countries. In this study, we (1) investigated the application of automated mass spectrometry analysis in pesticide residue detection and (2) compared the efficiency and accuracy of automated mass spectrometry analysis with that of traditional manual analysis. In brief, we used the QuEChERS sample pre-processing method to prepare raw mass spectrometry data for multi-residue pesticide testing by combined liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) and gas chromatography tandem mass spectrometry (GC-MS/MS). A signal peaks auto-detecting and comparing module, a matrix calibration curve automatic production module and an information platform for cloud-based automated analysis were developed to achieve a fully automated inspection process, from

---

Accepted: April 1, 2025.

\* Corresponding author, E-mail: sklin@acri.gov.tw

<sup>1</sup> Agricultural Chemicals Research Institute, Ministry of Agriculture, Taichung

data collection to the analysis of results. We found that automating the inspection process reduced analysis time from 240 minutes to 10 minutes, (an efficiency increase of more than 20 times). For recovery rate tests, four representative matrices (cabbage, apple, wheat, and oolong tea) and 15 quality control (QC) pesticides were used. Results did not show a significant difference in recovery rates between automated and manual analyses for any matrix. In summary, automated mass spectrometry data analysis technology features good accuracy and adaptability and can improve the efficiency of pesticide residue detection. Furthermore, in addition to pesticides, there is also potential to expand the use of this automated technology, including in the analysis of animal drugs, pharmaceuticals, food additives, and heavy metals.

**Key words:** pesticide residue, mass spectrometry data, automated data analysis, detection efficiency, cloud host