

# LabSolutions Insight 智能软件在农残检测中的高效判读应用

## GCMSMS-372

**摘要：**本文详细介绍了 LabSolutions Insight 多数据解析软件的智能化判读功能及其在质谱数据分析中的应用。该软件可高效处理 GCMS 和 LCMS 数据，通过【标记】功能设置多种判读参数（包括浓度、保留时间差、信噪比、峰面积等），并自动以颜色标识超限组分，显著提升大批量数据的分析效率。针对复杂组分（如农残检测中需要计算母体及其代谢物总和）的计算需求，软件支持代谢物换算系数设置，结合化合物组校准功能，实现最终含量的自动计算。Insight 软件的应用使法规标准符合性判断更加便捷，为实验室数据解析工作提供了智能化解决方案，大幅提升了分析效率和准确性。

**关键词：** LabSolutions Insight 数据解析 GCMS LCMS 智能

### 技术特点：

- ❖ LabSolutions Insight 软件的 Flag 标记功能，能够快速锁定超过限量值的化合物和样品，让数据处理变得智能。
- ❖ LabSolutions Insight 软件 Flag 标记可选内容丰富，可多方面考察检测结果，提高判读准确性。

食品农药残留的检测方法日新月异，质谱的发展使几十种甚至上百种的农药残留量可以在一次检测中同时获得并能准确定量，使检测成本下降，效率增加，并且提高了灵敏度，但大量多组分数据的处理耗时耗精力。

LabSolutions Insight 实现快速的质谱多数据处理，处理界面清晰，功能完备。使用【标记】功能，食品农残检测中可以实现限量值标记，以不同颜色突出显示目标化合物，超限值化合物及限量值可直观查看，除限量值外，保留时间差、S/N、峰面积、峰高等都可以作为标记参数进行设置，从而实现多角度考察检

测结果，提高判读准确性。在农残检测中，某些农药残留物由其母体和代谢物总和或多个代谢物总和表示，Insight 可以填入换算系数，自动完成复杂运算。除此之外，判读一般是以最终含量结果与限量值相比较，计算最终含量，可以将样品取样量及稀释倍数等数值输入软件，实现自动计算。

除了食品农药残留分析外，在食品兽药残留分析、中药中农药残留分析、环境中污染物分析、医学检验等项目中 Insight 也可实现同样效果。便捷的软件操作，使广大分析人员提升工作效率，工作更加井井有条。

### ■ LabSolutions Insight™ 简介

LabSolutions Insight 作为一款专业的质谱数据处理分析软件，在多数据多组分定量分析中优势显著，能够实现超乎寻常的分析速度，大幅提升数据分析的整体效率。

在数据审查方面，能从根本上简化繁琐的数据审查流程。用户只需将检测标准便捷地设置在软件系统中，Insight 便会依据这些标准高效处理并显示处理结果。它配备了实用的标记功能，能够将需要重点观测的数据和组分醒目地突出显示，让使用者一眼就能锁定关键信息。如此一来，使用者可以精准地将精力聚焦在真正有价值的的数据上，避免了无效的精力消耗，显著提升了工作效率，让数据审查工作变得更加轻松、高效。

### ■ 适用机型与软件

该软件适用的质谱数据，涵盖岛津全系列气相色谱质谱联用仪和液相色谱质谱联用仪采集的数据，如：GCMS-QP 及 GCMS-TQ 系列的 LabSolutions GCMS 或 GCMSsolution 文件、LCMS-2020/2050/8045/8050/8060(RX) 及 LCMS-9030/9050 的 LabSolutions LCMS 文件等。



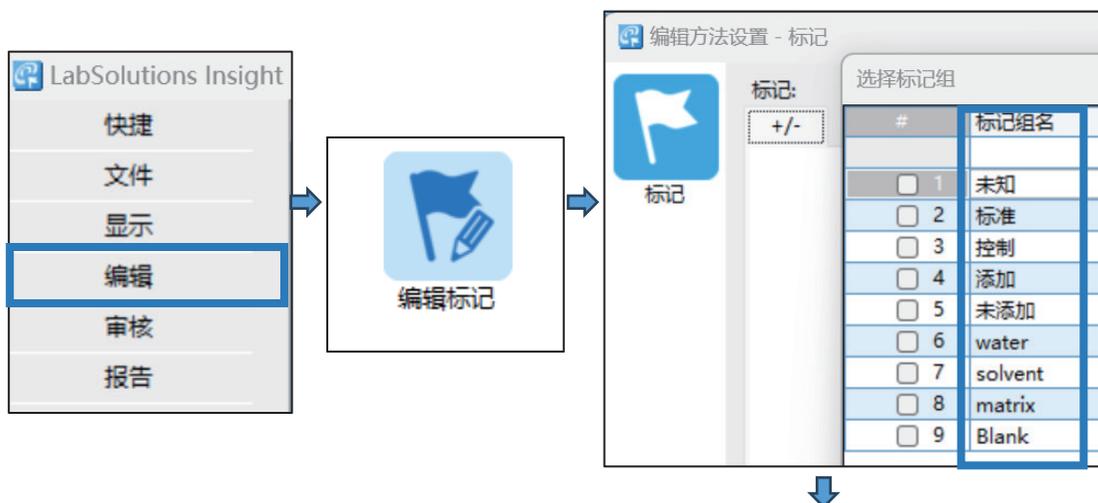
## ■ 结果与讨论

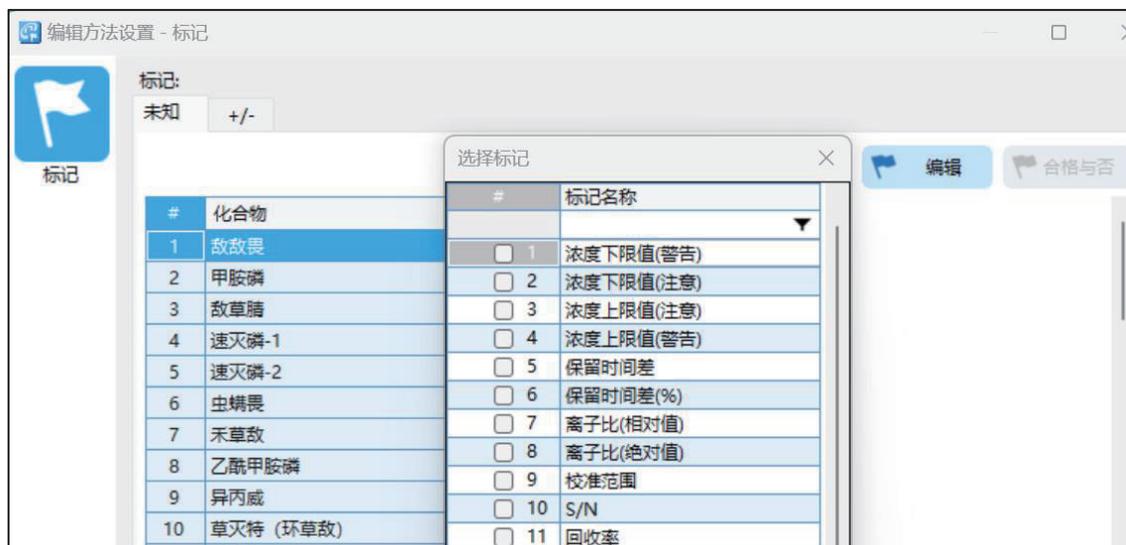
### 3.1 标记功能方便导入农残限量值，快速实现直观判读

在食品安全检测领域，GB 2763-2021 和 GB 2763.1-2022 作为重要的法规标准，明确规定了各类食品中农药最大残留限量（MRLs）。这些标准涉及不同食品基质中上万种农药的残留限量要求，且随着标准的定期更新，监控农药种类持续增加，限量要求也不断调整。针对这一复杂需求，LabSolutions Insight 软件提供了高效的解决方案：其标记功能支持用户自定义导入最新限量标准数据，系统可自动比对检测结果与限量值，实现超标样品的快速识别，大大简化了定量结果的判读流程。该标记设置可存为模板，下次使用时无需再次编辑直接加载即可。

#### 3.1.1 标记的设置

在 Insight 的菜单栏的【编辑】菜单下，选择【编辑标记】，添加标记组，可选标记组有【未知】、【标准】等多种样品类型，不仅可以控制未知样，也可控制其它类型的样品。选择好标记组后，即可设置标记，可设置的标记除上下限值外，还可设置保留时间、回收率等近三十项指标。





食品农残分析中，GB 2763 中的限值是非常重要的指标，它可以用以判断食品中的农药残留是否超标，数据浏览时，想要快速锁定阳性样品，限值的设置相当关键，也即浓度值的控制。在 Insight 软件中，可以设置“注意”和“警告”两级阈值，“注意”标记设置宽松的阈值，“警告”标记设置严格的阈值。农残分析中，“阳性”样品涉及两个概念，一个是“检出”，一个是“超标”，因此可以将严格控制的“限值”设置为“警告”，低于“限值”但有检出的值设置为“注意”，从而更好地区分样品。



### 3.1.2 标记颜色

在浏览检测结果时，样品中组分含量超过 3.1.1 中标记的限值时，在软件窗口，超过“警告”值会以红色显示，超过“注意”值会以橙色显示，两个颜色都非常显著，一目了然。如果这两种颜色不符合数据处理者的要求，也可在软件应用设置中更改为适合的颜色。

| #                                   | ^  | 标记 | 化合物名称 | 组号   | 浓度      |
|-------------------------------------|----|----|-------|------|---------|
| <input checked="" type="checkbox"/> |    | ▼  |       | ▼    | ▼       |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 44 |    | 亚胺唑   | ---- | 0.09992 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 45 |    | 烯肟菌胺  | ---- | 0.10014 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 46 |    | 噻草酸甲酯 | ---- | 0.09858 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 47 | 🚩  | 亚砷磷   | 1    | 0.29215 |

### 3.1.3 确认标记

如果除“浓度”以外还设置了多个标记，还可以单击标记图标，查看详细信息，明确哪些项目超出了设定值。

### 3.2 农药及代谢物的残留总量计算

GB 2763 对农药残留量的计算有明确的规定，农药残留量指“母体化合物及其代谢物、降解产物的总和”，但需要以标准中明确规定的形式计算。对于单一农药残留，且在色谱检测时仅出现一个峰的时候，直接计算该物质的含量即可，对于农药残留有异构体而体现为多峰或者有代谢物、降解物而出现多峰时，可采用软件自带的功能自动计算。

#### 3.2.1 无需折算系数的农药残留计算

对于某些农药，有多个异构体，或有同类化合物，在色谱图上表现为多个峰，如氯氟菊酯（单一农药，但色谱图上显示多个峰）、六六六、滴滴涕、硫丹等，可直接使用软件中的组校准和浓度求和计算总含量。

#### 3.2.2. 需要折算系数的农药残留计算

有代谢物 / 降解产物的农药，需要将代谢物 / 降解产物按换算系数折算为母体的农药，再计算总和。如：亚砷磷，按 GB2763-2021 中 4.473.3 残留物：亚砷磷、甲基内吸磷和砷吸磷之和，以亚砷磷表示。亚砷磷、甲基内吸磷和砷吸磷的换算系数分别为 1、1.069 和 0.939，将换算系数输入软件，再将其设置为为一组，即可得到样品中该残留物的最终含量。

| #  | 化合物        | 组号 | 校正因子     | 标准浓度因子   | 内标组 |
|----|------------|----|----------|----------|-----|
| 1  | 亚砷磷        | 1  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 2  | 甲基内吸磷      | 1  | 1.069000 | 0.000500 | 1   |
| 3  | 庚烯磷        | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 4  | 烯虫乙酯       | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 5  | 七氯         | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 6  | 2,6-二氯苯甲酰胺 | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 7  | 烯虫炔酯       | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 8  | 灭草环        | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 9  | 氯酞酸甲酯      | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 10 | 环氧七氯 (exo) | 0  | 1.000000 | 1.000000 | 1   |
| 11 | 3-羟基克百威    | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 12 | 2甲4氯异辛酯    | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 13 | 草除灵        | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 14 | 氟吡甲禾灵      | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 15 | 顺式-氯丹      | 0  | 1.000000 | 0.000500 | 1   |
| 16 | 砷吸磷        | 1  | 0.939000 | 0.000500 | 1   |

| # | 组名  | 绘制校准曲线 |
|---|-----|--------|
| 1 | 亚砷磷 | 浓度合计   |

设置组

设置换算系数

| #  | 标记 | 化合物名称        | 组号   | 浓度      |
|----|----|--------------|------|---------|
| 1  |    | 亚砷磷          | 1    | 0.02409 |
| 2  |    | 甲基内吸磷        | 1    | 0.02626 |
| 3  |    | 庚烯磷          | ---- | 0.02404 |
| 4  |    | 烯虫乙酯         | ---- | 0.02333 |
| 5  |    | 七氯           | ---- | 0.02416 |
| 6  |    | 2,6-二氯苯甲酰... | ---- | 0.02383 |
| 7  |    | 烯虫炔酯         | ---- | 0.02609 |
| 8  |    | 灭草环          | ---- | 0.02349 |
| 9  |    | 氯酞酸甲酯        | ---- | 0.02397 |
| 10 |    | 环氧七氯 (exo)   | ---- | 1.00000 |
| 11 |    | 3-羟基克百威      | ---- | 0.02221 |
| 12 |    | 2甲4氯异辛酯      | ---- | 0.02322 |
| 13 |    | 草除灵          | ---- | 0.02470 |
| 14 |    | 氟吡甲禾灵        | ---- | 0.02414 |
| 15 |    | 顺式-氧丹        | ---- | 0.02417 |
| 16 |    | 砷吸磷          | 1    | 0.02163 |

| #  | 标记 | 化合物名称 | 组号 | 浓度      |
|----|----|-------|----|---------|
| 47 |    | 亚砷磷   | 1  | 0.07198 |

折算后含量

最终含量

## ■ 结论

LabSolutions Insight 是一款适用于 GCMS 和 LCMS 的质谱多数据处理软件, 可大幅提升数据分析效率。其【标记】功能可直观显示限量值、超限值化合物, 并支持保留时间差、S/N、峰面积、峰高等多参数设置, 从而快速查看超过限值的样品和组分、多角度优化检测结果的判读准确性。此外, 针对需要计算母体和代谢物总和的复杂情况, 可在软件中设置代谢物换算系数, 再通过化合物组校准功能, 进行相关化合物的总和计算。

岛津应用云

