

C O D E X A L I M E N T A R I U S

国际食品标准



联合国粮食
及农业组织



世界卫生组织

E-mail: codex@fao.org - www.codexalimentarius.org

国际食品法典
分析术语指南
CAC/GL 72-2009

1 前言

分析和抽样法典委员会（CCMAS）已经同意通过了食品法典委员会和政府使用的分析术语，其中许多术语已包含在法典的程序手册（Codex Procedural Manual）中。多数情况下程序手册中的术语是在基本层次结构上随着时间而不断修改和完善的，且其文本可追溯至如 ISO 3534、GUM（不确定度评定与表示指南）、VIM（计量学的基本和通用属于的国际词汇）、IUPAC 橙皮书中或者被法典采纳的其他国际标准。国际标准中最初采用的新版本术语定义可以在更新保存的原始程序手册中找到。对于在最初的程序手册中另外增加的术语，也尽量保持现有术语与新术语概念上的连续性和相关性。现将这些术语以及已经被法典采纳的特定国际协议和指南中的术语列出。

2 分析术语

下一部分将给出分析术语的定义。

准确度 Accuracy

分析物 Analyte

适用性 Applicability

偏差 Bias

校准（校正） Calibration

有证标准物质 Certified reference material

约定量值 Conventional quantity value

临界值 Critical value

定义（经验）分析方法 Defining (Empirical) method of analysis

误差 Error

扩展测量不确定度 Expanded measurement uncertainty

适合性 Fitness for purpose

Horwit 比 HorRat

实验室间研究 Inter-laboratory study

实验室性能（能力）研究 Laboratory performance (Proficiency) study

检测限 Limit of detection

定量限 Limit of quantification

线性 Linearity

材料认证研究 Material certification study

被测变量 Measurand

测量方法 Measurement method

测量程序 Measurement procedure

测量不确定度 Measurement uncertainty

方法性能研究 Method-performance study

计量溯源性 Metrological Traceability

异常值 Outlier

精密度 Precision

质量保证 Quality assurance

合理分析方法 Rational method of analysis

回收率/回收率因素 Recovery/recovery factors

参考物质 Reference material

参考值 Reference value

重复性（再现性） Repeatability (Reproducibility)

重复性条件 Repeatability conditions

重复性（再现性）限 Repeatability (Reproducibility) limit

重复性（再现性）标准偏差 Repeatability (Reproducibility) standard deviation

重复性（再现性）相对标准偏差 Repeatability (Reproducibility) relative standard deviation

再现性条件 Reproducibility conditions

结果 Result

抗干扰性（耐受性） Robustness (ruggedness)

选择性 Selectivity

灵敏度 Sensitivity

示踪物 Surrogate

系统误差 Systematic error

正确度 Trueness

真值 True value

确证（确认）范围 Validated range

确证（确认）试验方法 Validated Test Method

确证（确认） Validation

验证 Verification

3 分析术语定义

准确度：测试值或测量值与其真值间的一致程度。

注：术语准确度应用在一系列测试或测量结果时，包括了随机组分和系统误差或者偏差组分。

当应用在测试方法时，术语准确度指的是正确度和精密度。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006. ISO Standard 5725-1: Accuracy (trueness and precision)

分析物：样品中待测或待确定的化学物质。

注：本定义不适用于分子生物学分析方法。

参考：Codex Guidelines on Good Laboratory Practice in Residue Analysis (CAC/GL 40-1993)

适用性：指满足分析物、基质和含量要求的分析方法。

注：除了要声明组分中每个因子都达到满意的适用范围以外，声明也应包含对某些分析物或者特定的基质和情况的不适用性。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

偏差：期望的测试结果或测量值与真值之间的差异。在实际应用中传统量值(VIM, 2007)可以代替真值。

注：偏差是总的系统误差与随机误差的比较。导致偏差的可能有一个或多个系统误差组分。偏差值越大，公认参考值的系统误差越大。

测量仪器的偏差通常是以多次重复测量某个量的误差表示。误差指示是：测量仪器的指示值减去相应输入值的真值。

期望值指的是一个随机变量的期望值，如分配值或长期平均水平{ISO 5725-1}。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

校准 (校正): 是建立测量值与参考标准值之间关联并由此确定待测样品中量值的过程。第一步是在规定的条件下, 确定由测量标准提供的量值与相应示值之间的关系, 第二步是利用此信息确定从示值获得测量结果的关系, 测量标准提供的量值及测量系统的示值都是具有测量不确定度的。

注: 校准可以用声明、校准函数、校准图、校准曲线或校准表格的形式来表示。在某些情况下, 它可以包括对测量不确定度示值的修正, 加修正值或乘修正因子。

校准不应与测量系统的调整及常被错误地称为“自校准”以及检定相混淆。

通常情况下, 上述定义中的第一步即被视为校准。

参考: VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

有证标准物质 (CRM): 附有由权威机构出具证书, 并使用有效的程序提供一个或多个指定的特征值及其测量不确定性和溯源性的标准物质。

注: 文件要以证书的形式出具 (见 ISO 指南 30:1992)。

应给出制备及证明标准物质的程序, 如 ISO 指南 34 和 ISO 指南 35。

在此定义中, “不确定度”包括了“测量不确定度”和标称特性值的“不确定度”两个含义, 这样做是为了一致和连贯。“溯源性”既包含了量值的“计量溯源性”也包含“标称特性值的溯源性”。

有证参考物质的特定量值要求具有测量不确定度的计量溯源性{认证和质量保证, 2006}。

ISO/REMCO 有类似定义 {认证和质量保证, 2006}, 但是对于量和标称特性使用了不同的修饰词, 分别为 *metrological* 和 *metrologically*。

参考: VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

New definitions on reference materials, Accreditation and Quality Assurance, 10:576-578, 2006

约定量值: 对给定的量值进行修订而得到的量值。

注: 术语约定真值有时候也用于此概念, 但并不鼓励其使用。有时约定量值也是真值的估计值。

约定量值通常被公认为具有很小的测量不确定度, 可以认为是零。

参考: VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

临界值 (L_C): 在给定的检验水平下, 净浓度或含量的值超过了某个水平, 而导致分析物中的待测物的浓度或含量超过了空白对照中的值。定义如下:

$$\Pr (\hat{L} > L_C \mid L=0) \leq \alpha$$

其中 \hat{L} 表示估计值, L 表示期望值或真值, L_C 表示临界值。

注:

临界值的定义对于定义检测限(LOD)有重要意义。

临界值 L_C 由下式表示

$$L_C = t_{1-\alpha, \nu} s_0$$

其中 $t_{1-\alpha, \nu}$ 指的是建立在自由度为 ν , 置信区间为 $1-\alpha$ 时的单边学生 t 检验, s_0 表示样本标准偏差。

如果 L 是已知方差的正态分布, 如自由度 $\nu = \infty$, 置信区间 α 为 0.05, 则临界值 $L_C = 1.645s_0$ 。

低于临界值 L_C 被定义为“未检出”, 但并不表示待测物质不存在, 不推荐在报告中写结果为“0”或者 $< LOD$, 而应在报告注明估计值及其不确定度。

参考: ISO Standard 11843: Capability of Detection-1, ISO, Geneva, 1997

Nomenclature in evaluation of analytical methods, IUPAC, 1995

定义 (经验) 分析方法: 指可以得到测量值的结果的一系列程序和步骤。

注：经验方法常用于合理方法无法涵盖时的场合。

通常经验方法的偏差为零。

参考：Harmonised guidelines for single-laboratory validation of methods of analysis, 2002

误差：测得的量值减去参考量值。

注：测量误差的概念应用在两种情况：当涉及存在单个参考量值时，如果用测量不确定度可以忽略不计的测量标准进行校准，或如果约定量值是给定的，这种情况下测量误差是未知的。如果假设被测量使用唯一的真值或范围可忽略的一组真值表征，在这种情况下，测量误差是未知的。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

扩展测量不确定度：合成标准不确定度与一个大于1的数字因子的乘积。

注：该因子取决于测量模型中输出量概率分布类型及所选取的包含概率。

扩展测量不确定度也被定义为扩展不确定度（expanded uncertainty）。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

适用性：用来表示测量产生的数据使用户在技术和管理水平上作出正确决策的程度。

参考：Eurachem Guide: The fitness for purpose of analytical methods: A laboratory guide to method validation and related topics, 1998

Horwitz 比：由 Horwitz 方程计算出来的可以表示再现性相对标准偏差的比值，

预测相对标准偏差($PRSD$)_R = $2C^{-0.15}$ ：

$HorRat(R) = RSD_R / PRSD_R$ ，

$HorRat(r) = RSD_r / PRSD_R$

其中 C 表示浓度的质量分数（分子和分母用相同单位表示）。

注：Horwitz 比表示的是大量的化学分析方法中的方法性能。

正常值在0.5~2之间，为了验证正确的PRSD值，浓度为 10^{-6} 时， $PRSD_R$ 值为16 %。

如果在实验室间研究，Horwitz比的正常范围在0.3~1.3，浓度低于0.12 mg/kg时， $PRSD$ 应为22%(The Analyst, 2000)。

参考：A simple method for evaluating data from an inter-laboratory study, J AOAC, 81(6):1257-1265, 1998 Recent trends in inter-laboratory precision at ppb and sub-ppb concentrations in relation to fitness for purpose criteria in proficiency testing, The Analyst, 125:385-386, 2000

实验室间研究：在实验室可控条件下，几个实验室测量均匀、稳定的物质的一个或多个试样的量或特性，其结果编入同一报告的研究。

注：参与研究的实验室数量越多，结果的统计参数可信度就越高。IUPAC-1987协议(Pure & Appl.Chem.,66,1903-1911(1994))要求至少有八个实验室来参与方法验证研究。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17 Edition, 2007

实验室性能（能力）研究：实验室间研究指的是由多家实验室对给定物质样品各自独立地开展一个或多个量的系列测量活动，每个实验室所用的样本或者采用的方法都应该是稳定的。报告的结果与其他实验室或者已知及指定参考值相比，通常用来提高实验室的检测能力。

注：实验室能力研究可以用来支持实验室的认证或者检验能力。如果研究是由某种在参与实验室管理控制组织进行组织，认证，法规或合同的方法，可以指定或者选择可能仅限于一个认可或等效的方法。在这种情况下，一个单一的测试样品不足以判断实验室能力。

实验室能力研究可以用来选择在实验室能力研究中可行的分析方法。如果所有的实验室或者大多数的实验室都使用相同的方法，那么此研究就可以作为方法水平研究，其中测试样本涵盖了分析物的所有浓度范围。

不同实验室指的是拥有独立设备、仪器、校准材料的独立实验室。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17 Edition, 2007

检测限 (LOD): 特定的方法在给定的置信度内可以从样本中研究待测物大于空白中的浓度或者量时的值。定义如下：

$$\Pr(\hat{L} \leq L_c | L = \text{LOD}) = \beta$$

其中 \hat{L} 是估算值，L 是期望值或真值， L_c 为临界值。

注：检测限由下式表示，

$$\text{LOD} \approx 2t_{1-\alpha, \nu} \sigma_0 \quad [\text{其中 } \alpha = \beta],$$

其中 $t_{1-\alpha, \nu}$ 是自由度为 ν ，置信区间为 $1-\alpha$ 的单边学生 t 检验， σ_0 为真值或期望值的标准偏差。

$\text{LOD} = 3.29 \sigma_0$ ，当对照样品中平均不确定度可以忽略时， $\alpha = \beta = 0.05$ ，L 一般被定义为已知常数方差。然而 LOD 不仅仅简单的定义为纯溶液背景值中一个固定的常数乘以标准偏差 (e.g. 3, 6, etc.)，这样做是极大的误导。正确计算 LOD 时必须考虑自由度， α 和 β ，以及分析物浓度、基质效应和杂质对 L 的影响。

这个定义对于在实时检测 PCR 中应用的非正态分布和异方差分布（如计数（泊松））实例中应考虑的例外情况提供了一个基础。

指定测量步骤很有必要，因为分布、标准偏差和空白在不同的测量过程中可能会有显著的不同。

在检测限水平时，采用特定基质、指定方法在一定合理或已经确定的可置信水平内可以得到阳性检出的结果。

参考：ISO Standard 11843: Capability of Detection-1, ISO, Geneva, 1997

Nomenclature in evaluation of analytical methods, IUPAC, 1995

Guidance document on pesticide residue analytical methods, Organization for Economic Cooperation and Development, 2007

定量限 (LOQ): 用来表示方法性能的参数，用以表述单个或者定量值，具有指定的相对标准偏差在 10% 或 6%。定义如下：

$$\text{LOQ} = k_Q \sigma_Q, \quad k_Q = 1/\text{RSD}_Q$$

其中 LOQ 为定量限， σ_Q 为标准偏差， k_Q 为 RSD 的倒数。（估计值 σ 的准确 RSD 是在自由度 ν 为 $1/\sqrt{2\nu}$ 时。）

注：

如果 σ 是已知常数，则 $\sigma_Q = \sigma$ ，因为估计量的标准偏差是独立的浓度， k_Q 用 10% 代替：

$$\text{LOQ} = (10 * \sigma_Q) = 10 \sigma_0$$

此时，LOQ 是 LOD 的 3.04 倍，正态分布中 $\alpha = \beta = 0.05$

在定量限水平时，采用特定基质、指定方法在一定合理或已经确定的可置信水平内可以得到阳性检出的结果。

该定义对于在实时检测 PCR 中应用的非正态分布和异方差分布（如计数（泊松））实例中应考虑的例外情况提供了理论基础。

参考：Nomenclature in evaluation of analytical methods, IUPAC, 1995

Guidance document on pesticide residue analytical methods, Organization for Economic Co-operation and Development, 2007

线性: 表述分析方法在一定范围内，提供仪器响应或结果与实验室样品中分析物量的能力。一般是用先前验证的数学公式来表示，线性范围是指试验的浓度在线性校正模型的应用在一个可接受的不确定性范围内。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

材料认证研究: 指采用标准物质，对含有基质的对照品进行定值，以便采用这些基质标准对照品进行方法研究，或者实验室比对。

注：材料认证实验研究指的是采用选定的方法来测定待测的参考物质，尽可能的提供待测物浓度或性质的最小

偏差，和最小的相关不确定性。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

被测量： 待测量的量

注：被测量的技术规范要求知道量的种类、带有量的现象、物体或者物质的状态的描述，包括有关的成分和化学含量的名称。

在化学中，物质或化合物的“分析”或名称，有时被用来称为被测量，这种用法是不正确的，因为这些术语未涉及到量。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

测量方法： 对测量所用的操作的逻辑性安排的一般性描述。

注：测量方法可以用不同方式表述，例如：替代测量法，微差测量法，零位测量法，直接测量法，间接测量法。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

测量程序： 根据一种或多种测量原理以及给定的测量方法，在测量模型和获得测量结果所需计算的基础上，对被测量所作的详细描述。

注：测量程序通常要写成充分而详尽的文件，以便操作者能够进行测量。

测量程序可以包括有关目标测量不确定度的陈述。

测量程序有时被称为标准操作规程，缩写为 SOP。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200:2008

测量不确定度： 根据所用到的信息，表征赋予被测量的量值分散性的非负参数。

注：测量不确定度包括由系统影响引起的分量，例如与修正量和测量标准所赋量值有关的分量以及定义的不确定度。有时对估计的系统影响未作修正，而是当作不确定度分量处理。

此参数可以是诸如称为标准测量不确定度的标准偏差（或其特定的倍数），或者是说明了包含概率的区间的半宽度。

测量不确定度一般由若干个分量组成，其中一些分量可以根据一系列测量的测量值的统计分布按不确定的 A 类评定进行评定，并用实验标准差表征，而另一些分量则可根据经验或其他信息假设的概率密度函数按测量不确定度的 B 类评定进行评定，也用标准差表征。

总之，对于给定的信息，测量不确定度是一个与测量结果有关的参数，对结果进行修正即是对相关不确定度进行修正。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200:2008

方法性能研究： 在实验室间研究中，所有的实验室都遵循相同的书面协议，使用相同的测试方法来测量相同的一系列测试样本。报告的结果用来估算方法的性能特征。通常这些性能特征指的是实验室间和实验室内的精密度，必要时，也包括其他相关特征如系统误差、回收率、内部质量控制参数、灵敏度、定量限和适用性。

注：在此类分析量的研究中使用的材料通常是可以代表在实际应用中的物质，如基质、测试组份的量、干扰组分以及影响。

此研究中实验室的数量、测试样本的数量、测试的量以及其它细节都应在研究手册中注明。部分研究方案是进行分析时的书面操作流程。

此类研究最重要的特性是必须遵循相同的书面协议和准确的测试方法。

几种方法可以采用相同的测试材料进行比较。如果所有的实验室都使用相同系列的实验方法，且每种方法都有单独的统计分析研究，此研究就成为一系列的方法优化研究。此类研究也可以定义为方法对比研究。

参考：Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

计量溯源性： 测量结果通过文件规定的不间断的校准链将其与规定的参照对象联系起来特性，每个链接点均对

测量不确定度有贡献。

注：本定义中，参照对象可以定义为通过实际实现的测量单位，或包括无量纲的测量单位的测量程序，或测量标准。计量溯源性要求建立校准登记关系。

参照对象的技术规范必须包含其用于确定校准等级关系时间，以及关于参照对象的其他有关计量信息，比如在校准等级关系中什么时候实施第一次校准。

对于在测量模型中具有一个以上输入量的测量，每个输入量值本身应该是计量溯源的，并且校准等级关系可以形成一个分支结构或框架。为每个输入值建立计量溯源性所做的努力应该是与测量结果的贡献相适应的。

测量结果的计量溯源性并不保证测量不确定度对给定目的是适当的，也不保证没有错误。

如果两个测量标准之间的比较是用来核查，及必要时用于对量值进行修正，以及对其中一个测量标准赋予测量不确定度时，则测量标准间的比较可以看作是一种校准。

国际实验室认可组织 ILAC 认为确认计量溯源性的要素是向国际测量标准或国家测量标准的不间断的溯源链，形成文件测量程序、认可的技术能力、向国际单位 SI 的计量溯源性及校准间隔。（见 ILAC P-10: 2002）

缩写词“溯源性”有时是指“计量溯源性”，也有时用于其他概念，诸如样本可追溯性、文件可追溯性、仪器可追溯性或材料溯源性等，其含义是指某项目的历程（轨迹）。因此，为了避免混淆，最好使用术语“计量溯源性”全称。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

Harmonized guidelines for internal quality control in analytical chemistry laboratories, 1995

ILAC P-10, 2002

异常值：与本系列中其他结果不一致的一组结果值。

注：

下面的练习用于推荐处理异常值。

a) Cochran's 或 Grubb's 检验被用来判断离群值或异常值：

- 如果测试的统计量小于或等于临界值的 5 %，则此项目的测试被认为是正确的；
- 如果测试的统计量大于临界值的 5 % 或小于等于临界值的 1 %，则此项目的测试被认为是离群，用一个星号标示；
- 如果测试的统计量大于临界值的 1 %，则此项目被认为是统计一场，用两个星号标示。

b) 其次是调查离群值或统计的异常值是否可以用技术误差来解释，如：

- 遗漏的测量程序，
- 错误的计算，
- 记录测试结果时的笔误，
- 错误样本的分析。

当误差来自记录或计算时，可疑值应用正确值来代替；当误差来自错误的分析样本时，结果应用正确值来代替。这些校正步骤做完以后，应通过对离群值或异常值重复测试对其取代。如果对技术误差的解释证明可疑的测试结果是不可替代的，那么此值应被认为是真正的异常值，不属于实验结论。

c) 当任何离群值或异常值仍然没有解释或者拒绝为属于一个边远实验室，离群值被认为是正确项目而保留，否则将被视为异常值而舍弃，除非有很好的统计学理由决定保留他们。

参考：ISO Standard 5725-1: Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results Part 1: General principles and definitions, ISO, Geneva, 1994

ISO Standard 5725-2: Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results Part 2: Basic method for the determination of repeatability and reproducibility of a standard measurement method, ISO, Geneva, 1994

精密度：在规定的条件下，独立的测试或测量结果的一致程度。

注：精密度只取决于随机误差的分布，与真值或指定值无关。

测量精密度通常用不精密程度和测试结果的标准偏差来计算，精密度越低，标准偏差越大。

精密度的测量取决于规定的测试条件。重复性和再现性条件是在极端条件下的特殊集合。

两个极端条件下的中间状态也可以想到，当实验室内一个或多个因素允许变化时（如实验室间操作者、使用的仪器、使用的仪器校准、环境、溶剂批次、测量之间时间间隔），特定条件下是有用的。

精密度通常用标准偏差来表示。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

ISO Standard 5725-3: Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results Part 3: Intermediate measures of the precision of a standard measurement method, ISO, Geneva, 1994

质量保证：所有的计划和统计行为都为分析结果可以满足量的要求提供必要的保证。

参考：Harmonized guidelines for internal quality control in analytical chemistry laboratories, 1995

合理分析方法：对于特定的化合物或分析物的确定，可能有几个可用的等效分析方法。

参考：Harmonized guidelines for the use of recovery information in analytical measurement, 1998

ISO/IEC Guide 17025: 2005: General requirements for the competence of calibration and testing laboratories, ISO, Geneva, 2005

回收率/回收因子：加入或添加到测试样本中的分析物的量反应在测量结果中的比例。

注：回收率是由公式 $R = C_{\text{obs}} / C_{\text{ref}}$ 计算，由通过分析方法过程得到的 C_{obs} ，即观察到的浓度或量，除以分析物中含有的参考物的量 C_{ref} 。

C_{ref} 表示：(a) 参照物的确认的值，(b) 由明确的方法测量，(c) 定义为添加或 (d) 边界回收。

回收率的主要目的在于提供一种将待测分析物从一个复杂的基质中转移到一个简单溶液里的解决方法，在此过程中减少可预期的损失。

参考：Harmonized guidelines for the use of recovery information in analytical measurement, 1998

Use of the terms “recovery” and “apparent recovery” in analytical procedures, 2002

标准物质：一种或几种特性足够均匀并很好地确定了物质。主要用于分析质量控制、新方法的建立、测量系统刻度、实验室间比对分析或直接用作分析标准。

注：标称特性检查提供标称特性值和相关的不确定性。该不确定度不是测量不确定度。

赋予量值或未赋予量值的标准物质都可用于测量精密度控制，但只有赋予量值的标准物质才能用于校准或测量准确度控制。

有些标准物质所附量值计量学上溯源至国际单位制以外的测量单位。在一个特定测量中，给定标准物质只能用于校准或质量保证之一。

标准物质说明书应包括物质的追溯性，指明其来源和加工过程。{认证和质量保证, 2006}

国际标准化组织/标准物质委员会 (ISO/REMCO) 有类似的定义，但是用术语“测量过程”来意指检查，它包含了量的测量和标称特性的检查。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

New definitions on reference materials, Accred. Qual. Assur., 10:576-578, 2006

标准值：用来和相同种类量值相比较的量值。

注：标准值可以是被测量的真实量值，在这种情况下，该值是未知的。也可以是一个约定量值，在这种情况下，该值是已知的。

一个标准量值和联合测量不确定度通常用来作为：

- a) 一个物质如有证标准物质
- b) 一个测量程序标准
- c) 一个测量标准的比较

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

重复性 (再现性)： 在重复性 (再现性) 测量条件下的测量精密度。

参考：ISO 3534-1 Statistics, vocabulary and symbols-Part 1: Probability and general statistical terms, ISO, 1993
ISO Standard 78-2: Chemistry – Layouts for Standards – Part 2: Methods of Chemical Analysis, 1999)
Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

AOAC International methods committee guidelines for validation of qualitative and quantitative food microbiological official methods of analysis, 2002.

重复性条件： 为获得独立测试/测量结果，由同一操作员按相同的方法，使用相同的测试或测量仪器，在短時間间隔内对同一测试/测量的观测条件。

注：重复性条件包括：相同的测量程序或测试方法、同一操作者、同一条件下使用的同一测量或测试仪器、同一地点和短時間间隔内的重复。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

重复性 (再现性) 限： 代表了在重复性 (再现性) 条件下一系列的测试或测量结果的数值，两个测试结果的绝对差小于或等于此数的概率为 95%。

注：用符号 $r_{[R]}$ 来表示。{ISO 3534-2}

当在重复性 (再现性) 条件下得到的两个单独测试结果相比应该在重复性 (再现性) 范围内， $r_{[R]} = 2.8\sigma_{r[R]}$ 。{ISO 5725-6, 4.1.4}。

当一组测量值用来表示重复性 (再现性) 限时 (现在被称为临界差)，需要应用到更复杂的公式，见 ISO 5725-6: 1994, 4.2.1 和 4.2.2。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

ISO 5725-6 “Accuracy (trueness and precision) of a measurement methods and results—Part 6: Use in practice of accuracy value”, ISO, 1994

Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

重复性 (再现性) 标准偏差： 在重复性 (再现性) 条件下测试或测量结果的标准偏差。

注：是用来衡量的在重复性 (再现性) 条件下，测试或测量结果分布和分散性的值。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

重复性 (再现性) 相对标准偏差 (变异系数)： 重复性 (再现性) 标准偏差除以平均值。

$RSD_{r[R]}$ 由平均值除以重复性 (再现性) 标准偏差。

注：相对标准偏差(RSD)是在定量研究中有用的代表精密度的量值。

这样做可以用不同的均值来比较一系列数值的变异性。RSD 值在一个合理的范围内，以便于比较不同浓度的差异值的一个独立的分析物的量。

协同测试的结果可以用重复性(RSD_r)和再现性($RSD_{[R]}$)的 RSD 值来归纳描述。

RSD 也被认为是变异系数。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 1: General statistical terms used in probability, ISO, Geneva, 2006

AOAC International methods committee guidelines for validation of qualitative and quantitative food microbiological official methods of analysis, 2002.

再现性条件： 由不同的操作员按相同的方法，使用不同的测试或测量仪器，对同一测试/测量对象进行观测，以获得独立测试/测量结果的观测条件。

参考：ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006

结果： 赋予被测量的一组量值以及其它有用的相关信息。

注：测量结果通常包含关于一组量值的有关信息，一些比其它方法更能代表被测量的信息，这可以用概率密度函数的形式表示。

测量结果通常表示为单个被测量的量值和一个测量不确定度，对于某些用途而言，如果认为测量不确定度可以忽略不计，则测量结果可以表示为单个被测量的量值，在许多领域中这是表示测量结果的常用方式。

在传统文献和 VIM 以前的版本中，测量结果定义为被赋予被测量的量值，并根据上下文说明是指示值、未修正结果还是已修正结果。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

抗干扰性 (耐受性)：表示一种测量分析方法的能力，其不被方法参数中小的变化影响，在日常使用中提供可靠性的指示。

参考：ICH Topic Q2 Validation of Analytical Methods, the European Agency for the Evaluation of Medicinal Products: ICH Topic Q 2 A - Definitions and Terminology (CPMP/ICH/381/95), 1995

Harmonized guidelines for single laboratory validation of methods of analysis, Pure and Appl. Chem., 2002

选择性：选择性是指某种方法可以确定混合物或基质中特定的分析物，并且其他成分的杂质没有类似的行为。

注：选择性是分析化学中为了表达在其他组成成分存在下某特定分析方法可以对特定分析物检测的程度的推荐词条。相同的概念使用术语特异性是不鼓励的，因为这很容易引起混淆。

参考：Selectivity in analytical chemistry, IUPAC, Pure Appl Chem, 2001

Codex Alimentarius Commission, Alinorm 04/27/23, 2004

Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, 2007

灵敏度：测量系统示值的变化除以相应的被测量值的变化所得的商。

注：灵敏度可能决定于被测量的量值。

对被测量值要考虑的变化必须比测量系统的分辨率大。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

示踪物：纯化合物或元素添加到测试材料中，其化学和物质行为可以代表原来的物质。

参考：Harmonized guidelines for the use of recovery information in analytical measurement, 1998

系统误差：在重复测量中保持恒定不变或按可预见的方式变化的测量误差的分量。

注：系统测量误差的参考量值是真值，或是测量不确定度可以忽略不计的测量标准物质的测量值，或是约定量值。

系统误差和其来源可以是已知的，也可以是未知的，对于已知的系统测量误差可以采用修正来补偿。

系统误差等于量误差减去随机测量误差。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

正确度：无数多次重复测量的测量值的平均值与一个参考量值之间的一致程度。

注1：测量正确度不是一个量，不能用数值表示，但一致程度的测量可见 ISO 5725。

注2：测量正确度相反的与系统测量误差有关，与随机测量误差无关。

注3：术语测量正确度不应用于测量准确度，反之亦然。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

真值：与量的定义一致的量值。

注：在描述测量的误差方法中，认为真值是唯一的，不存在单个的真值，只存在于定义一致的一组真值，然而，这一组值，从原理和实际上是未知的，还有一些方法认为，免去真值的概念，从而依靠测量结果的计量兼容性的

概念以评定其有效性。

当被测量的定义不确定度与测量不确定度的其它分量相比可以忽略时，认为被测量可以用实际唯一的量值表示。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

确证（确认）： 对规定的要求是否适合于分析方法预期目的的验证。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

确证（确认）测试方法： 一个为了特定的目的而完成了验证研究，可接受的测试方法。验证研究中已确证了该方法的准确度和可靠性。

参考：ICCVAM Guidelines for the nomination and submission of new, revised and alternative test methods, 2002

确证（确认）范围： 对已进行验证的分析方法的浓度范围。

参考：Harmonized guidelines for single-laboratory validation of methods of analysis, 2002

验证（检定）： 提供客观证据证实一个被评估项目满足规定的要求。

注：应用时应考虑测量不确定度。

被评估项目可以是一个过程、测量程序、材料、化合物或测量系统。

规定的要求可以是满足制造厂的技术规范。

按 VIM 规定，在法制计量和合格评定中，通常检定还包含对测量系统的检查、贴标签和发布检定证书。

检定不应该与校准相混淆，不是每次检定都是一次确认。

在化学中，对包含的实体或活性的一致性检定，要求有对该实体或活性的结构或特性的描述。

参考：VIM, International Vocabulary of Metrology – Basic and general concepts and associated terms, 3rd edition, JCGM 200: 2008

4 参考文献

1. A simple method for evaluating data from an inter-laboratory study, *J AOAC*, 81(6): 1257-1265, 1998.
2. AOAC International Methods committee guidelines for validation of qualitative and quantitative food microbiological methods of analysis, *J AOAC*, 85(5): 1187-1200, 2002.
3. Codex Alimentarius Commission, Food and Agriculture Organization of the United Nations, World Health Organization, Alinorm 04/27/23, Report of the twenty-fifth session of the Codex Committee on Methods of Analysis and Sampling, 2004.
4. Codex Alimentarius Commission, Procedural Manual, 17th Edition, Food and Agriculture Organization of the United Nations, World Health Organization, 2007.
5. Codex Alimentarius Commission, Food and Agriculture Organization of the United Nations, World Health Organization, Guidelines on Good Laboratory Practice in Residue Analysis (CAC/GL 40-1993)
6. Commission Decision of 14 August 2002 implementing council directive 96/23/EC concerning the performance of analytical methods and the interpretation of results, The Commission of the European Communities, 2002.
7. Compendium of Analytical Nomenclature, Definitive Rules, International Union of Pure and Applied Chemistry, 3rd Edition, 1997.
8. Eurachem Guide: The fitness for purpose of analytical methods: A laboratory guide to method validation and related topics, 1998.
9. Guidance document on pesticide residue analytical methods, OECD health and safety publications, series on testing and assessment No. 72 and series on pesticides No. 39, Organization for Economic Co-operation and Development, Paris, 2007.
10. GUM, Guide to the expression of uncertainty in measurement, ISO, Geneva, 1993.
11. Harmonised guidelines for single-laboratory validation of methods of analysis, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, 74(5):835-855, 2002.
12. Harmonized guidelines for the use of recovery information in analytical measurement, IUPAC/ISO/AOAC International/Eurachem technical report, 1998.
13. ICCVAM Guidelines for the nomination and submission of new, revised and alternative test methods, Interagency Coordinating Committee on the Validation of Alternative Methods (ICCVAM), National Institute of Environmental Health Sciences, US Department of Health and Human Services, 2003.
14. ICH Topic Q2 Validation of Analytical Methods, The European Agency for the Evaluation of Medicinal Products: ICH Topic Q 2 A - Definitions and Terminology (CPMP/ICH/38 1/95), 1995.
15. ILAC P-10, ILAC policy on traceability of measurement results, 2002.
16. ISO/IEC Guide 17025:2005: General requirements for the competence of calibration and testing laboratories, ISO, Geneva, 2005
17. ISO Standard 11843: Capability of Detection-1, ISO, Geneva, 1997.
18. ISO Standard 3534-1: Vocabulary and Symbols Part 1: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006.
19. ISO Standard 3534-2: Vocabulary and Symbols Part 2: Applied Statistics, ISO, Geneva, 2006.
20. ISO Standard 5725-1: Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results, Part 1: General principles and definitions, ISO, Geneva, 1994.
21. ISO Standard 5725-3: Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results Part 3: Intermediate measures of the precision of a standard measurement method, ISO, Geneva, 1994.
22. ISO Standard 78-2: Chemistry – layouts for standards – Part 2: Methods of chemical analysis, ISO, second edition, 1999.
23. New definitions on reference materials, *Accreditation and Quality Assurance*, 10:576-578, 2006.
24. Nomenclature for the presentation of results of chemical analysis, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure and Applied Chemistry*, 66(3):595-608, 1994.
25. Nomenclature in evaluation of analytical methods including detection and quantification capabilities, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure and Applied Chemistry*, 67(10):1699-1723, 1995.
26. OIML V1:2000, International vocabulary of terms in legal metrology, 2000.

27. Polymerase chain reaction technology as an analytical tool in agricultural biotechnology, *J AOAC*, 88(1):128-135, 2005.
28. Practical procedures to validate method performance and results for analysis of pesticides and veterinary drug residues and organic contaminants in food, A. Ambrus, International workshop on principles and practices of method validation, FAO/IAEA/AOAC/IUPAC, p.37, Budapest, 1999.
29. Protocol for the design, conduct and interpretation of method-performance studies, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.* 67(2):331-343, 1995.
30. Quality management and quality assurance-vocabulary ISO 8402, second edition, 1994.
31. Recent trends in inter-laboratory precision at ppb and sub-ppb concentrations in relation to fitness for purpose criteria in proficiency testing, *The Analyst*, 125:385-386, 2000.
32. Selectivity in Analytical Chemistry, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, 73(8):1381-1386, 2001.
33. Terms and definitions used in connections with reference materials, ISO Guide 30:1992.
34. The harmonised guidelines for internal quality control in analytical chemistry laboratories, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, 67:649-666, 1995.
35. The international harmonised protocol for the proficiency testing of (chemical) analytical laboratories, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, 65, 2123-2144, 1993.
36. Use of the terms “recovery “ and “apparent recovery” in analytical procedures, International Union of Pure and Applied Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, 74(11): 2201-2205, 2002.
37. VIM, International vocabulary of metrology - Basic and general concepts and associated terms, JCGM 200: 2008, also published as ISO/IEC Guide 99-12:2007.