



中华人民共和国国家标准

GB/T 35656—2017

化学分析方法验证确认和内部质量控制 实施指南 报告定性结果的方法

Guideline for verification and validation of chemical analysis method and
internal quality control—Method on reporting qualitative test reports

2017-12-29 发布

2018-07-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

目 次

前言	I
引言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 总则	2
4.1 化学分析方法分类	2
4.2 报告定性结果方法的特点	2
4.3 报告定性结果方法验证确认的要求	2
4.4 限度测试	2
4.5 定性广谱筛查方法	3
4.6 编写标准操作程序	3
5 对方法性能指标验证和确认的要求	3
5.1 灵敏度	3
5.2 选择性和特异性	3
5.3 阈值	4
5.4 假阴性率和假阳性率	4
5.5 检出限	5
6 内部质量控制	5
附录 A (资料性附录) 方法的阈值计算示例	6
附录 B (资料性附录) 灵敏度特异性能指标确认示例	10
附录 C (资料性附录) 干扰试验及消除干扰的示例	16
附录 D (资料性附录) 方法阈值确定示例	21
附录 E (资料性附录) t 检验的临界值表	22
参考文献	23

前 言

本标准与下列标准构成化学分析实验室检测方法验证确认以及建立和实施内部控制体系系列标准：

- GB/T 32464 化学分析实验室内部控制 利用控制图核查分析系统；
- GB/T 32465 化学分析方法验证确认和内部控制要求；
- GB/T 32467 化学分析方法验证确认和内部控制 术语和定义；
- GB/T 33464 化学分析标准操作程序编写与使用指南；
- GB/T 35655 化学分析方法验证确认和内部控制实施指南 色谱分析；
- GB/T 35657 化学分析方法验证确认和内部控制实施指南 基于样品消解的金属组分分析。

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准由全国质量监督重点产品检验方法标准化技术委员会(SAC/TC 374)提出并归口。

本标准起草单位：四川省产品质量监督检验检疫院、中检华纳(北京)质量技术中心有限公司、四川理工学院、中检联盟(北京)质检技术研究院有限公司、四川省食品药品检验检测院、安徽省产品质量监督检验研究院、北京颖泰嘉和分析技术有限公司、成都宏亿实业集团有限公司。

本标准主要起草人：郑卫东、张丽萍、胡丹、付大友、谭文渊、黄璞、余晓琴、林森、范志刚、王俊芳、林吉柏、丁媛丽、林红、王玥。

引 言

报告定性结果的检测是化学分析中重要的一类分析形式,其特点表现为检测结果以定性的方式报告。定性结果的表述分为两种情况。一是直接使用定性检测的方法,得出并报告定性的结果;二是使用定量的方法检测,得出连续的定量结果,使用特定的方法将定量结果转化为定性结果,最后报告定性结果。二元分类测试是定量分析和定性分析中的特殊情况,检出/未检出试验(presence/absence test)或阳性/阴性试验(positive/negative test)是二元分类测试的两种典型情况。限度测试(limit test)和定性广谱筛查[qualitative Broad-band(non-targeted) analyte screening]即为使用二元分类测试技术的两种典型报告定性结果的方法。

实验室要正确掌握和使用定性结果表述方法,除了按照 GB/T 32465—2015 中的规定,实施方法验证确认和建立内部质量控制体系以外,还应关注这类方法在检测和报告结果方面的特殊性。

化学分析方法验证确认和内部质量控制 实施指南 报告定性结果的方法

1 范围

本标准给出了化学分析中报告定性结果方法验证确认和实验室内部质量控制的要求和实施指南。
本标准适用于化学分析中报告定性结果方法验证确认和实验室内部质量控制。
本标准不适用于采样。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

GB/T 6379.1 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第1部分:总则与定义

GB/T 14666 分析化学术语

GB/T 19000 质量管理体系 基础和术语

GB/T 27025—2008 检测和校准实验室能力的通用要求

GB/T 32465—2015 化学分析方法验证确认和内部质量控制要求

GB/T 32467 化学分析方法验证确认和内部质量控制 术语及定义

GB/T 33464 化学分析标准操作程序编写与使用指南

ISO 11843-1 检测能力 第1部分:术语和定义(Capability of detection—Part 1:Terms and definitions)

3 术语和定义

GB/T 6379.1、GB/T 14666、GB/T 19000、GB/T 32467 和 ISO 11843-1 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1

阳性预测值 positive predictive values; PPV

检测所得到的真实阳性结果与总阳性结果之比。

注:总阳性结果包括真实阳性结果和假阳性结果之和。阳性预测值=真阳性结果/(真阳性结果+假阳性结果)。

3.2

阴性预测值 negative predictive values; NPV

检测所得到的真实阴性结果与总阴性结果之比。

注:总阴性结果包括真实阴性结果和假阴性结果之和。阴性预测值=真阴性结果/(真阴性结果+假阴性结果)。

3.3

定性广谱筛查 qualitative broad-band(non-targeted) analyte screening

使用特定的方法,同时检测多个目标组分,将检测结果与参考数据比较,得出“有”或者“无”目标组分的结论。