

Funktionshandbuch

SCIEX OS Software

Berechnete Spalten



RUO-IDV-05-15884-DE-A



August 2024

Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments, im Ganzen oder in Teilen, ist strengstens untersagt, sofern keine schriftliche Genehmigung von SCIEX vorliegt.

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrückliche oder implizite Garantien wie beispielsweise Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, unabhängig davon, ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder aus Geschäftsbeziehungen oder Handelsbrauch entstehen, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab; zudem übernimmt SCIEX keine Verantwortung und Haftungsverhältnisse, einschließlich solche in Bezug auf indirekte oder nachfolgend entstehenden Schäden, die sich aus der Nutzung durch den Käufer oder daraus resultierende widrige Umstände ergeben.

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

Die hier erwähnten Marken und/oder eingetragenen Marken, einschließlich deren Logos, sind Eigentum der AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Inhaber in den Vereinigten Staaten und/oder anderen Ländern (siehe sciex.com/trademarks).

AB Sciex[™] wird unter Lizenz verwendet.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd. Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3 Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Inhalt

1 Überblick	4
2 Formeln	
Formeleditor	5
Einfache Arithmetik	7
Komplexere Funktionen	8
IF-Funktion	9
Operatoren	
Die Option Ergebnistextwerte behandeln als	
Einfache Extraktion von nicht standardmäßigen Informationen	
Beispiele: Formeln	
GET-Funktionen	
Aggregatfunktionen	
Numerische Funktionen	
Textfunktionen	
IF-Funktion	36
3 Bedingtes Lookup	
Editor für das bedingte Lookup	42
Beispiele: Bedingtes Lookup	
A Formelreferenz	
Kontakt	
Kundenschulung	79
Online-Lernzentrum	79
SCIEX Support	79
Cybersicherheit	79
Dokumentation	79

Überblick

Berechnete Spalten sind Spalten, die entweder mithilfe einer Formel oder einer Tabelle für das bedingte Lookup erstellt werden. Berechnete Spalten werden in einer Prozessierungsmethode erstellt.

Während der Prozessierung werden die Formeln und Tabellen für das bedingte Lookup angewendet, und die Ergebnisse werden in benutzerdefinierten Spalten in der Ergebnistabelle angezeigt.

Hinweis: Wenn eine berechnete Spalte verwendet wird, die in einer früheren Version von SCIEX OS erstellt wurde, dann überprüfen Sie die Ergebnisse, um sicherzustellen, dass diese korrekt sind.

In diesem Dokument wird die Verwendung der Funktion "Berechnete Spalten" dargestellt.

Hinweis: Formeln können als frml-Dateien zur späteren Verwendung oder zur Freigabe importiert und exportiert werden.

Formeleditor

Die folgende Abbildung zeigt die Oberfläche für den Formeleditor.

Abbildung 2-1: Formelseite



Element	Beschreibung
1	Der Schritt Berechnete Spalten im Arbeitsablauf der Prozessierungsmethode. Klicken Sie auf diese Option, um die Seite "Berechnete Spalten" zu öffnen und klicken Sie dann auf Hinzufügen > Formel .

Element	Beschreibung				
2	Das Feld Formelname . Geben Sie einen Namen für die Formel ein.				
	Hinweis: Der Formelname darf keine eckigen Klammern oder runde Klammern enthalten und er darf nicht identisch sein mit dem Namen einer Funktion.				
	Hinweis: Nachdem eine Formel in einer Markierungsregel oder einer anderen Formel verwendet wurde, kann der Name der Formel nicht mehr geändert werden.				
	Tipp! Nach der Prozessierung wird die Formel als Spalte in der Ergebnistabelle hinzugefügt. Die Kopfzeile der Spalte ist der Name der Formel. Für eine optimale Nutzung der Bildschirmfläche empfiehlt es sich, kurze Formelnamen zu verwenden. Ausführliche Informationen können im Feld Beschreibung hinzugefügt werden.				
	Tipp! Verwenden Sie bei einer Berechnung mit mehr als einer Formel aussagekräftige Präfixe und Zahlen, um die Sequenz zu bestimmen, in der die Formeln verwendet werden.				
3	Das Feld Beschreibung . Die Beschreibung wird auf der Seite "Berechnete Spalten" angezeigt.				
	Tipp! Berücksichtigen Sie die Formel wenn möglich in der Beschreibung . So ist es nicht erforderlich, dass der Benutzer die Formel öffnet, um die Inhalte anzuzeigen.				
4	Ein Rechner, der gebräuchliche Funktionen und Operatoren enthält. Siehe Abschnitte: Formelreferenz und Operatoren.				
5	Das Feld Formel . Geben Sie die Funktionen, Operatoren, Spalten und Werte ein, die in den Formeln verwendet werden sollen, bzw. wählen Sie diese aus.				
6	Validierungsabschnitt. Wenn das Feld Formel Fehler enthält, dann wird in diesem Abschnitt eine Fehlermeldung angezeigt. In der Meldung wird die Position identifiziert, an der der Fehler aufgetreten ist. Wenn der Benutzer beispielsweise folgende Formel eingibt:				
	<pre>IFS([Sample Type] == 'Standard'; 'Yes'; 'No')</pre>				
	Dann wird die folgende Fehlermeldung angezeigt:				
	The Formula contains an invalid function at position 1: IFS.				
7	Eine Option zum Hervorheben der Klammern im Feld Formel .				

Element	Beschreibung				
8	Eine Reihe von Optionen, mit denen gesteuert wird, was mit den Texteinträgen geschieht. Das Feld Ergebnistextwerte behandeln als ist wichtig in Spalten der Ergebnistabelle, die sowohl Zahlen- als auch Textausgaben enthalten können, z. B. N/A, degenerate, <0, <0, >0, not enough points, less than <i>n</i> points und das Symbol für unendlich. Weitere Informationen finden Sie im Abschnitt: Die Option Ergebnistextwerte behandeln als				
9	Verfügbare Spalten der Ergebnistabelle. Klicken Sie auf eine Spalte, um diese zum Formel-Feld hinzuzufügen.				
10	Verfügbare Regressionsparameter. Klicken Sie auf einen Parameter, um diesen zum Formel-Feld hinzuzufügen.				
	Hinweis: Regressionsparameter werden ausschließlich im Teilfenster "Kalibrierkurve" angezeigt. Diese werden nicht als Spalten in der Ergebnistabelle aufgenommen.				
	Hinweis: Regressionsparameter werden in berechneten Spalten nur für die Regressionstypen "Linear", "Linear durch Null", "Quadratisch" und "Quadratisch durch Null" unterstützt. Sie werden nicht unterstützt für die Regressionstypen Leistung , Wagner , Hill oder Mittlerer Reaktionsfaktor .				
11	Verfügbare Probentypen. Wählen Sie die Probentypen aus, bei denen die Funktion ausgeführt wird.				
	Hinweis: Dieser Abschnitt wird für Aggregatfunktionen angezeigt, d. h. Funktionen, die auf mehrere Zeilen angewendet werden.				
12	Option zum Einfügen von Proben, für die das Kontrollkästchen Verwendung nicht aktiviert wurde.				
	Hinweis: Dieser Abschnitt wird für Aggregatfunktionen angezeigt. Standardmäßig werden nur Zeilen mit aktiviertem Kontrollkästchen Verwendung in Berechnungen einbezogen, die Aggregatfunktionen verwenden.				
13	Optionen zum Speichern oder Verwerfen der Formel.				

Einfache Arithmetik

Einfache Formeln können erstellt werden, um grundlegende mathematische Operationen durchzuführen.

Beispiel: R²

[r]*[r]

In diesem Beispiel wird der Multiplikationsoperator (*) verwendet, um den R-Wert mit sich selbst zu multiplizieren, um den R²-Wert zu berechnen.

Beispiel: Gesammelte Punkte pro Sekunde

```
[Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60)
```

In diesem Beispiel werden die Punkte entlang der Grundlinie durch die Sekunden vom Start bis zum Ende eines integrierten chromatografischen Peaks geteilt. Diese Formel verwendet die Operatoren Division (/), Multiplikation (*) und Subtraktion (–).

Komplexere Funktionen

Es sind viele weitere Funktionen und Kontrollstrukturen verfügbar. Einige gebräuchliche Funktionen wie z. B. **MEAN**, **MAX** und **MIN** werden im Rechner unter der Formelleiste angezeigt. Drücken Sie für eine vollständige Liste der Syntaxdetails, Operatoren und Funktionen auf **F1** auf der Seite des Formeleditors.

Beispiel: MEAN([Area]) für Standards

Bei der Verwendung einer Funktion, die mit allen Werten arbeitet, kann der Benutzer die Proben auswählen, die in die Berechnung einbezogen werden.



Abbildung 2-2: Nur den Mittelwert der Peak-Fläche der Standardproben erhalten

Beispiel: Funktionen zusammenfügen

Einfache Arithmetik und komplexere Funktionen können zusammengefügt werden. Verwenden Sie zum Beispiel die folgende Formel, um die gesammelten Mittelpunkte pro Sekunde zu berechnen:

```
MEAN([Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60))
```

Hinweis: Die Kombination von Aggregatfunktionen wird nicht empfohlen. Erstellen Sie eine separate Spalte für jede Aggregatfunktion, und erstellen Sie dann eine Formel, die diese Spalten verwendet.

IF-Funktion

Die **IF**-Funktion führt einen logischen Test durch und gibt dann als Ergebnis true oder false zurück. Testen Sie mit verschachtelten **IF**-Funktionen mehr als eine Bedingung. Die **IF**-Funktion kann mit anderen logischen Funktionen wie **und** und **oder** verwendet werden, um einen logischen Test zu erweitern.

Die grundlegende Syntax für die IF-Anweisung lautet wie folgt:

```
IF(condition;value if true;value if false)
```

Wobei Folgendes gilt:

- condition ist ein Wert oder ein logischer Ausdruck, der wahr oder falsch sein kann.
- *value if true* ist ein Wert, der in der Spalte der Ergebnistabelle angezeigt werden soll, wenn *condition* wahr ist.
- *value if false* ist ein Wert, der in der Spalte der Ergebnistabelle angezeigt werden soll, wenn *condition* falsch ist.

Hinweis: Die Zeichen && und || können für **und** und **oder** verwendet werden. Die Operatoren **und** und **oder** müssen von Leerzeichen umgeben sein, die Operatoren && und || jedoch nicht.

Hinweis: Das Symbol der **IF**-Funktion kann über den Rechner ausgewählt, eingegeben oder aus einer anderen Quelle kopiert werden. Bei der **IF**-Funktion muss die Groß-/ Kleinschreibung nicht beachtet werden.

Hinweis: Bei **IF**-Anweisungen mit mehr als einer *<condition>*, kann die fehlende Bewertung selbst einer *<condition>* dazu führen, dass ein *<value if false>* in der benutzerdefinierten Spalte in der Ergebnistabelle angezeigt wird.

Die **IF**-Funktion erlaubt die Verwendung anderer numerischer Funktionen (wie **Mittelwert** und **STDEV**) in der Formel in den Ausdrücken *condition*, *value if true* oder *value if false*.

condition

Einige Beispiele einer condition umfassen:

```
[Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

[Retention Time] > 1 and [Retention Time] < 2

value if true und value if false

Die Ausdrücke value if true und value if false können entweder eine Zahl oder Text sein.

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT
window';
'not applicable')</pre>
```

Hinweis: Zeilenumbrüche sind in Formeln nicht zulässig. Wenn eine Beispiel-Formel in das Formel-Feld eingefügt wird, dann entfernen Sie die Zeilenumbrüche.

Operatoren

Tabelle 2-1: Operatoren (im Rechner enthalten)

Operator	Beschreibung
Ι	Dividiert den Wert vor dem Operator durch den Wert nach dem Operator.
*	Multipliziert den Wert vor dem Operator mit dem Wert nach dem Operator.
-	Subtrahiert den Wert vor dem Operator vom Wert nach dem Operator.
=	Zeigt die Ausgabe der Funktion an.
+	Addiert den Wert vor dem Operator zu dem Wert nach dem Operator.
()	Gibt die Reihenfolge der Operationen an. Die zuerst durchzuführenden Berechnungen müssen in Klammern eingeschlossen werden.

Tabelle 2-2: Vergleichende und logische Operatoren (können manuell eingegeben werden)

Operator	Beschreibung
<	Wenn der Wert vor dem Operator kleiner ist als der Wert nach dem Operator, dann lautet das Ergebnis true. Andernfalls ist das Ergebnis false.
<=	Wenn der Wert vor dem Operator kleiner oder gleich dem Wert nach dem Operator ist, dann lautet das Ergebnis true. Andernfalls ist das Ergebnis false.
>	Wenn der Wert vor dem Operator größer ist als der Wert nach dem Operator, dann lautet das Ergebnis true. Andernfalls ist das Ergebnis false.
>=	Wenn der Wert vor dem Operator größer oder gleich dem Wert nach dem Operator ist, dann lautet das Ergebnis true. Andernfalls ist das Ergebnis false.
!=	Wenn der Wert vor dem Operator nicht gleich dem folgenden Wert ist, dann ist das Ergebnis true. Andernfalls ist das Ergebnis false.

Operator	Beschreibung				
&&	Wenn die Ausdrücke vor und nach dem Operator beide "true" sind, dann ist das Ergebnis true. Wenn einer oder beide Ausdrücke "false" sind, dann ist das Ergebnis false. Zeichendarstellung des booleschen Operators und . && , und oder beide können in Formeln verwendet werden.				
II	Wenn der Ausdruck vor oder nach dem Operator "true" ist, dann ist das Ergebnis true. Wenn beide Ausdrücke "false" sind, dann ist das Ergebnis false. Zeichendarstellung des booleschen Operators oder. , oder oder beide können in Formeln verwendet werden.				
true	<pre>Bei Spalten mit Kontrollkästchen werden Spalten identifiziert, bei denen das Kontrollkästchen aktiviert ist. Beispiel¹: IF([Sample Type] = 'Standard'&&[Used] = true&&[Reportable] = true; 'Qualified STD reported';'')</pre>				
false	Bei Spalten mit Kontrollkästchen werden Spalten identifiziert, bei denen das Kontrollkästchen deaktiviert ist.				

Tabelle 2-2: Vergleichende und logische Operatoren (können manuell eingegeben werden) (Fortsetzung)

Die Option Ergebnistextwerte behandeln als

Die Option **Ergebnistextwerte behandeln als** steuert, wie Text in einer angepassten Spalte der Ergebnistabelle, die Text oder eine Kombination aus Zahlen und Text enthält, behandelt wird. Zum Beispiel enthält die Spalte **Probentyp** nur Text, die Spalte **Vorläufermasse** enthält nur Zahlenwerte und die Spalte **Berechnete Konzentration** enthält eventuell Zahlenwerte und Text.

Die Option **Ergebnistextwerte behandeln als** kann für jede Formel auf den Wert festgelegt werden, der für die in der Formel verwendeten Funktionen angewendet werden kann. Die folgenden Werte sind verfügbar:

- Null
- Ignorieren (Leerprobe)
- Fehler (n. z.)
- Originaltext

Hinweis: Weitere Informationen zu diesen Optionen finden Sie im Dokument: Hilfesystem.

Wenn Berechnungen mit den folgenden Funktionen durchgeführt werden, dann sind die empfohlenen Optionen Null, Ignorieren (Leerprobe) oder Fehler (n. z.): ANZAHL, MAX,

¹ Zeilenumbrüche sind in Formeln nicht zulässig. Wenn eine Formel in das Formel-Feld eingefügt wird, dann entfernen Sie die Zeilenumbrüche.

STDEV, SUM, MIN, MEDIAN, GET, GETGROUP, SLOPE, INTERCEPT, MAD, GETSTAT, GETSAMPLECLOSEST, GETSAMPLECLOSESTHIGH, GETSAMPLECLOSESTLOW oder GETSAMPLEEQUAL. Diese Optionen werden auch bei den IF-Anweisungen empfohlen, wenn die Formel Spalten enthält, die möglicherweise numerische Werte enthalten.

Die Option **Originaltext** wird für die Verknüpfung von Textwerten empfohlen.

Beispiel

In diesem Beispiel werden zwei Spalten verknüpft, die Textwerte enthalten. In diesem Fall wird die Option **Originaltext** empfohlen.

[Sample Name] + ' '+ [Sample Type]

Mit dieser Formel wird eine Zusammenfassungsspalte hinzugefügt, die den Namen der Probe und deren Typ enthält. Lautet der Probenname beispielsweise *Calibrator 1* und der Typ *Standard*, dann enthält die berechnete Spalte Calibrator 1 Standard. Bei dieser Formel wird **Ergebnistextwerte behandeln als** auf **Originaltext** festgelegt.

Mithilfe von ' ' wird eine Leerstelle hinzugefügt.

Einfache Extraktion von nicht standardmäßigen Informationen

Mit den berechneten Spalten können Benutzer Informationen anzeigen, die nicht standardmäßig in den Ergebnistabellen verfügbar sind.

Um beispielsweise R^2 als Spalte in der Ergebnistabelle anzuzeigen, klicken Sie auf R^2 in der Liste **Regressionsparameter**.



Abbildung 2-3: Eine benutzerdefiniert Spalte mit berechneten Spalten erstellen

Beispiele: Formeln

GET-Funktionen

Das lonenverhältnis des Standards mit der Fläche suchen, die der Fläche der unbekannten Probe am nächsten ist (GETSAMPLECLOSEST)

Abbildung 2-4: Formel: Ref MRM Ratio

 Accept chang 	es and return to Calco	ulated Columns	× Discard							
Formula name	a name Ref MRM Ratio									
Description	Description Find ion ratio of a standard closest in area to unknown sample									
COUNT	MAX	STDEV	Clear	GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio];[Area])						
SUM	MIN	MEDIAN	0							
MEAN	ABS	IF)	Formula Details Columns Search Regression parameters GETSAMPLECLOSEST value will be calculated using the following sample types:						
LEFT	RIGHT	ISNUMBER	*	Accuracy r Unknowns						
/ Note: The "Orig	inal text* option is re	commended for for	= mulas	Accuracy Acceptance Image: Product of the sample name contains Type comma separated text Acq. Method Name Slope Acq. Method Name Slope Acq. Start Time (min) Intercept Acquisition Date & Time Quadratic coefficient Actual Concentration Linear coefficient Adduct / Charge Constant term Area Only if the sample name contains						
non-numeric va	ext values as Error	(N/A)	×	Area / Height Blanks Area Ratio Solvent Area Ratio of comparison Solvent Asymmetry Factor Only if the sample name contains Barcode V Process & Close Print Close Help						

Hinweis: Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die in der vorhergehenden Abbildung angezeigten Einstellungen.

Tabelle 2-3: Einstellungen

Name	Formel Ausgabe P		Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSEST ([Ion Ratio];[Area])	Das Ionenverhältnis eines Standards mit der Fläche, die der Fläche der anderen Proben am nächsten ist. Siehe Spalte 1 in der Abbildung: Abbildung 2-5.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein

Abbildung 2-5: Ergebnistabelle: Berechnete Spalten mit Ref MRM Ratio, High Ref MRM Ratio, Low Ref MRM Ratio, Equal Ref MRM Ratio

								1	2	3	4	
Index	Sample Name ⊽	Sample Type ♥	Component Name ⊽	Component Type ⊽	Component Group Name	Area ⊽	' Ion Ratio ⊽	*Ref MRM Ratio ⊽	*High Ref MRM Ratio ⊽	′ *Low Ref MRM Ratio ⊽	*Equal Ref MRM Ratio 🗊	7 Actual Concentrat
1	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.172e1	0.782	1.177	1.177	N/A	N/A	N/A
7	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.818e2	0.536	1.177	1.177	N/A	N/A	N/A
13	STD_01	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.501e3	1.177	1.177	1.177	1.177	1.177	4.50
19	STD_02	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	5.679e4	1.128	1.128	1.128	1.128	1.128	18.76
25	STD_03	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.128e5	1.217	1.217	1.217	1.217	1.217	37.50
31	STD_04	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.709e5	1.130	1.130	1.130	1.130	1.130	75.00
37	STD_05	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.099e5	1.153	1.153	1.153	1.153	1.153	112.50
43	STD_06	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.806e5	1.196	1.196	1.196	1.196	1.196	150.00
49	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.084e2	0.858	1.177	1.177	N/A	N/A	N/A
163	2920810037	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	5.721e4	1.159	1.128	1.217	1.128	N/A	N/A
169	2120910317	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.039e5	1.087	1.217	1.217	1.128	N/A	N/A
175	1320702698	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	5.332e4	1.178	1.128	1.128	1.177	N/A	N/A
181	4420804700	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	4.264e4	1.212	1.128	1.128	1.177	N/A	N/A

GETSAMPLECLOSESTHIGH, GETSAMPLECLOSESTLOW und GETSAMPLEEQUAL

Tabelle 2-4: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen	
High Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio];[Area])	Das Ionenverhältnis des nächstgelegenen Standards mit einer Fläche größer oder gleich der Fläche der unbekannten Probe. Siehe Spalte 2 in der Abbildung: Abbildung 2-5.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein	
Low Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTLOW ([Ion Ratio];[Area])	Das Ionenverhältnis des nächstgelegenen Standards mit einer Fläche kleiner oder gleich der Fläche der unbekannten Probe. Siehe Spalte 3 in der Abbildung: Abbildung 2-5.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein	
Equal Ref MRM Ratio	GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio];[Area])	Das Ergebnis von GETSAMPLEEQUAL ausschließlich für Standards. Siehe Spalte 4 in der Abbildung: Abbildung 2-5.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein	

Die Fläche zweier aufeinanderfolgender Proben vergleichen: GETVALUE für die Analyse der Wiederherstellung und Verschleppung

Tabelle 2-5: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Previous SampleIndex	[Sample Index]-1	Der Index der vorherigen Probe in der Ergebnistabelle.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Previous SampleArea	GETVALUE ([Area]; [PreviousSampleIndex]; [Sample Index])	Die Flächen der Komponenten in der Probe, die vor dieser erfasst wurde.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein

Sample Type	Actual Concentration	Component Type 🛛 🖓	Area 🔻	*PreviousSampleArea 🛪	Sample ⊽ Index	*PreviousSampleIndex
Unknown	N/A	Quantifiers	8.699e6	N/A	1	0.000
Solvent	N/A	Quantifiers	4.174e3	8.699e6	2	1.000
Solvent	N/A	Quantifiers	5.963e3	4.174e3	3	2.000
Solvent	N/A	Quantifiers	3.220e3	5.963e3	4	3.000
Solvent	N/A	Quantifiers	5.013e3	3.220e3	5	4.000
Blank	N/A	Quantifiers	1.694e6	5.013e3	6	5.000
Blank	N/A	Quantifiers	1.680e6	1.694e6	7	6.000
Blank	N/A	Quantifiers	1.706e6	1.680e6	8	7.000
Standard	0.000050	Quantifiers	1.498e6	1.706e6	9	8.000
Standard	0.000050	Quantifiers	1.488e6	1.498e6	10	9.000
Standard	0.000050	Quantifiers	1.476e6	1.488e6	11	10.000
Standard	0.000100	Quantifiers	1.627e6	1.476e6	12	11.000
Standard	0.000100	Quantifiers	1.569e6	1.627e6	13	12.000
Standard	0.000100	Quantifiers	1.727e6	1.569e6	14	13.000
Standard	0.000500	Quantifiers	2.186e6	1.727e6	15	14.000
Standard	0.000500	Quantifiers	2.333e6	2.186e6	16	15.000
Standard	0.000500	Quantifiers	2.077e6	2.333e6	17	16.000
Standard	0.001000	Quantifiers	2.833e6	2.077e6	18	17.000
Standard	0.001000	Quantifiers	3.514e6	2.833e6	19	18.000
Standard	0.001000	Quantifiers	2.659e6	3.514e6	20	19.000
Standard	0.002500	Quantifiers	4.150e6	2.659e6	21	20.000
Standard	0.002500	Quantifiers	4.256e6	4.150e6	22	21.000
Standard	0.002500	Quantifiers	4.333e6	4.256e6	23	22.000
Standard	0.005000	Quantifiers	7.957e6	4.333e6	24	23.000

Abbildung 2-6: Ergebnistabelle: PreviousSampleArea

Werte aus zwei Übergängen in eine Zeile verschieben: GETGROUP

Tabelle 2-6: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
GET Ametryn Group CalcConc	<pre>GET([Calculated Concentration];'Ametryn 1')+GET([Calculated Concentration];'Ametryn 2')</pre>	Die gesamte berechnete Konzentration für Ametryn 1 und Ametryn 2.	Unbekannte	Fehler (n. z.)	Nein
GETGROUP Qual CalcConc	GETGROUP ([Calculated Concentration];2)	Die berechnete Konzentration für den zweiten Übergang in der Gruppe.	Unbekannte	Fehler (n. z.)	Nein

Sample Type	Component Group Name	✓ Component Name	v Calculated Concentration	▼ *GET Ametryn Group CalcConc	v *GETGROUP Qual CalcConc	7 Component Type ♥
Unknown	Ametryn	Ametryn 1	0.0070940	0.0138135	0.0067196	Quantifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 2	0.0067196	0.0138135	0.0067196	Qualifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 1	0.0001011	N/A	< 0	Quantifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 2	< 0	N/A	< 0	Qualifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 1	0.0000261	N/A	< 0	Quantifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 2	< 0	N/A	< 0	Qualifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 1	0.0000620	0.0001700	0.0001081	Quantifiers
Blank	Ametryn	Ametryn 2	0.0001081	0.0001700	0.0001081	Qualifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 1	0.0746195	0.1501806	0.0755612	Quantifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 2	0.0755612	0.1501806	0.0755612	Qualifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 1	0.0782140	0.1561682	0.0779542	Quantifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 2	0.0779542	0.1561682	0.0779542	Qualifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 1	0.0752105	0.1515225	0.0763120	Quantifiers
Unknown	Ametryn	Ametryn 2	0.0763120	0.1515225	0.0763120	Qualifiers

Abbildung 2-7: Ergebnistabelle: GET Ametryn Group CalcConc und GETGROUP Qual CalcConc

Statistikwerte für die Markierung und Berichterstellung verfügbar machen: GETSTAT

Tabelle 2-7: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
CV%STD	GETSTAT ('Percent CV';'Calculated Concentration')	Der Prozent VK -Wert für die Berechnete Konzentration aus der Statistiktabelle für Standards und QCs.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Av_RT_ Prefix	GETSTAT('MEAN';'Retention Time';'Sample Name Prefix')	Der Mittelwert für die Retentionszeit für nach Probennamen-Präfix gruppierte Proben.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein

Abbildung 2-8: Ergebnistabelle: CV%STD

Index	Sample Name	v Sample Type	Actual Concentration	*CV%STD 1	*Av_RT_Prefix	Component Type	Area 1	Retention Time Delta	Retention Time	v Expec v	Calculated Concentration	Accuracy	Precursor Mass V
12	0.25 ng/mg hair extr_3	Standard	0.250000	0.26	421	Quantifiers	1.596e8	0.02	4.20	4.22	0.2917783	116.71	290.200
12	0.5 ng/mg hair extr_1	Standard	0.500000	1.29	421	Quantifiers	2.989e8	0.01	4,21	4.22	0.5319017	106.38	290.200
13_	0.5 ng/mg hair extr_2	Standard	0.500000	1.29	4.21	Quantifiers	2.934e8	0.01	4.21	4.22	0.5263914	105.28	290.200
13	0.5 ng/mg hair extr_3	Standard	0.500000	1.29	4.21	Quantifiers	2.770e8	0.00	4.22	4.22	0.5183921	103.68	290.200
13	0.75 ng/mg hair extr_1	Standard	0.750000	1.98	4.21	Quantifiers	4.096e8	0.02	4.20	4.22	0.7080770	94.41	290.200
13	0.75 ng/mg hair extr_2	Standard	0.750000	1.98	4.21	Quantifiers	4.260e8	0.01	4.21	4.22	0.7174477	95.66	290.200
14	0.75 ng/mg hair extr_3	Standard	0.750000	1.98	4.21	Quantifiers	4.120e8	0.01	4.21	4.22	0.7360602	98.14	290.200
14_	1.0 ng/mg hair extr_1	Standard	1.000000	3.62	421	Quantifiers	5.032e8	0.01	4.20	4.22	0.8636387	86.36	290.200
14	1.0 ng/mg hair extr_2	Standard	1.000000	3.62	4.21	Quantifiers	4.846e8	0.00	4.21	4.22	0.8438771	84.39	290.200
14	1.0 ng/mg hair extr_3	Standard	1.000000	3.62	4.21	Quantifiers	5.026e8	0.02	4.20	4.22	0.9055541	90.56	290.200

	G		Group by	Actual Concentration	Sample Type	Standard	 Metric type 	Calculated Concentration	▼ Save Results and Export			
Row	Com	Actual Concentr	Num. Values	Mean	Standard Devi	Percent CV	Average Accuracy across Re	Value #1	Value #2	Value #3		
7	Norc	0.007500	3 of 3	0.0086871	0.0003241	3.73	115.83	0.0083630	0.0086871	0.0090111		
8	Norc	0.010000	3 of 3	0.0113456	0.0004335	3.82	113.46	0.0108480	0.0116410	0.0115479		
9	Norc	0.025000	3 of 3	0.0289848	0.0014867	5.13	115.94	0.0272738	0.0299608	0.0297200		
10	Norc	0.050000	3 of 3	0.0581842	0.0014612	2.51	116.37	0.0592287	0.0565145	0.0588095		
11	Norc	0.075000	1 of 1	0.1184153	N/A	N/A	157.89	0.1184153				
12	Norc	0.100000	3 of 3	0.1734780	0.0897117	51.71	173.48	0.1236648	0.1197261	0.2770432		
13	Norc	0.250000	2 of 2	0.2923103	0.0007523	0.26	116.92	0.2928423	0.2917783			
14	Norc	0.500000	3 of 3	0.5255618	0.0067929	1.29	105.11	0.5319017	0.5263914	0.5183921		
15	Norc	0.750000	3 of 3	0.7205283	0.0142437	1.98	96.07	0.7080770	0.7174477	0.7360602		
16	Norc	1.000000	3 of 3	0.8710233	0.0314946	3.62	87.10	0.8636387	0.8438771	0.9055541		

Abbildung 2-9: Ergebnistabelle: Av_RT_Prefix

Index	Sample Name	v Sample v	Actual Concentration	· ·CV%STD	v "Av_RT_Prefix 1	Component Type	Area 1	Retention Time Delta	Retention . Time	RT FXPec	Calculated Concentration	7 Accuracy	V Precursor Mass
846	0.01 ng/mg hair extr_3	Standard	0.010000	2.57	4.10	Quantifiers	1.248e7	0.01	4.10	4.10	0.0100916	100.92	304.200
873	0.025 ng/mg hair extr_1	Standard	0.025000	2.51	4.10	Quantifiers	2.638e7	0.01	4.10	4.10	0.0249202	99.68	304.200
900	0.025 ng/mg hair extr_2	Standard	0.025000	2.51	4.10	Quantifiers	2.952e7	0.01	4.09	4.10	0.0260588	104.24	304.200
927	0.025 ng/mg hair extr_3	Standard	0.025000	2.51	4.10	Quantifiers	2.812e7	0.00	4.10	4,10	0.0260162	104.06	304.200
954	0.05 ng/mg hair extr_1	Standard	0.050000	3.20	4.09	Quantifiers	5.626e7	0.02	4.09	4.10	0.0493750	98.75	304.200
981	0.05 ng/mg hair extr_2	Standard	0.050000	3.20	4.09	Quantifiers	5.180e7	0.00	4.10	4.10	0.0473298	94.66	304.200
10	0.05 ng/mg hair extr_3	Standard	0.050000	3.20	4.09	Quantifiers	5.619e7	0.02	4.08	4.10	0.0504120	100.82	304.200
10	UknownCK_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	7.659e7	0.00	4.10	4.10	0.0746195	N/A	304.200
10	UknownCX_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	8.119e7	0.01	4.09	4.10	0.0782140	N/A	304.200
10	UknownCK_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	8.461e7	0.02	4.09	4.10	0.0752105	N/A	304.200

					G	roup by Sam	ple Name prefi	x 👻 San	nple Type All	amples 🔹	Metric type	Retention	Time
tow	Com	Sample Name	Num. Values	Mean	Standard Devi	Percent CV	Value #1	Value #2	Value #3	Value #4	Value #5	Value #6	Value #7
0	Coca	0.05 ng/mg hair extr	3 of 3	4.09	0.01	0.20	4.09	4.10	4.08				
1	Coca	0.1 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.10	4.08	4.10				
2	Coca	0.25 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.10	4.08				
3	Coca	0.5 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.09	4.09	4.10				
4	Coca	0.75 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.09	4.09				
	Coca	1.0 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.09	4.08				
	Coca	Blank hair extr	3 of 3	4.10	0.01	0.13	4.09	4.10	4.10				
7	Coca	Postspike hair extr 0.5 ng	1 of 1	4.11	N/A	N/A	4.11						
3	Coca	UknownCX	3 of 3	4.09	0.01	0.18	4.10	4.09	4.09				
2	Coca	Warmup - MeOH Blank	7 of 7	3.84	0.15	3.97	3.91	3.64	3.82	3.96	3.76	3.72	4.08

FormeIn

Aggregatfunktionen

Aggregatfunktionen sind Funktionen, die auf mehrere Zeilen angewendet werden. Beispielsweise sucht die Funktion **MIN** nach dem niedrigsten Wert für eine Spalte in allen Zeilen der Ergebnistabelle. Die Funktion **MEAN** berechnet den Durchschnittswert für eine Spalte.

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
STD COUNT Area	COUNT([Area])	Die Anzahl der Werte für eine Fläche, die für Standardproben gefunden wurde	Standards	Ignorieren	Nein
STD MAX Area	MAX([Area])	Der größte Wert für eine Fläche, der für Standardproben gefunden wurde	Standards	Ignorieren	Nein
STD MEAN Area	MEAN([Area])	Der Durchschnittswert für eine Fläche für Standardproben	Standards	Ignorieren	Nein
STD MEDIAN Area	MEDIAN([Area])	Der Mittelwert für eine Fläche für Standardproben	Standards	Ignorieren	Nein
STD MIN Area	MIN([Area])	Der Mindestwert für eine Fläche für Standardproben	Standards	Ignorieren	Nein
STD STDEV Area	STDEV([Area])	Die Standardabweichung des Flächenwertes für Standardproben	Standards	Ignorieren	Nein

Tabelle 2-8: Einstellungen (Fortsetzung)

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
STD SUM Area	SUM([Area])	Der Gesamtwert aller Flächenwerte für Standardproben	Standards	lgnorieren	Nein

Abbildung 2-10: Ergebnistabelle: Aggregatfunktionen

	Index	Sample Name ⊽	Sample Type 🔻	Component Name ⊽	Area ⊽	Used ⊽	*STD MIN Area	*STD MAX Area	*STD MEAN Area	*STD SUM Areas	*STD MEDIAN Area	*STD STDEV Area ^V	*STD COUNT Area ^V
	45	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	74381.256	\checkmark	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	56	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	74351.280		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	67	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	783230.401		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	78	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	778397.852		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	89	STD 1	Standard	Ametryn 1	7933715.370		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	100	STD 1	Standard	Ametryn 1	7836685.698		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
	111	STD 10	Standard	Ametryn 1	81066809.991		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
•	122	STD 10	Standard	Ametryn 1	79964706.071		74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000

Numerische Funktionen

Tabelle 2-9: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Rounded Calc. Conc	ROUND([Calculated Concentration];3)	Berechnete Konzentration, gerundet auf 3 Dezimalstellen.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Calc. Conc Ceiling	CEILING([Calculated Concentration])	Die kleinste Ganzzahl, die größer oder gleich Berechnete Konzentration ist.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Calc. Conc Floor	FLOOR([Calculated Concentration])	Die größte Ganzzahl, die kleiner oder gleich der Berechnete Konzentration ist.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

ndex	Sample Na	▼ Sample Type ▼	Component Name	_⊽ Com T	ponent _v	Component	Area ⊽	Actual Concentration	Calculated Concentration	*Rounded Calc. Conc.	*Ceiling	7 *Floor
1	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	9.172e1	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
7	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	6.818e2	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
13	STD_01	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	9.501e3	4.50	1.62324	1.623	2.0	1
19	STD_02	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	5.679e4	18.76	25.07507	25.075	26.0	25
25	STD_03	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	1.128e5	37.50	52.83989	52.840	53.0	52
31	STD_04	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	1.709e5	75.00	81.65117	81.651	82.0	81
37	STD_05	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	2.099e5	112.50	100.99784	100.998	101.0	100
43	STD_06	Standard	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	2.806e5	150.00	136.07280	136.073	137.0	136
49	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	6.084e2	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
55	QC_Low_6040	Quality Control	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	2.162e4	8.00	7.63356	7.634	8.0	7
61	QC_L1_6041	Quality Control	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	4.458e4	20.00	19.01736	19.017	20.0	19
67	QC_L2_6042	Quality Control	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	1.282e5	60.00	60.48824	60.488	61.0	60
73	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	1.363e4	N/A	3.67084	3.671	4.0	3
79	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quan	ntifiers vi	td3	1.354e4	N/A	3.62390	3.624	4.0	3
85	LO Pool	eculte Table Di	splay Setting						3.79319	3.793	4.0	3
91	MID LO Po		spiay Settings	,					31.20914	31.209	32.0	31
97	MID LO Po Pr	oject: BIQ3							40.31222	40.312	41.0	40
103	MID LO Po Sh	now and hide specific	columns in the res	ults table					40.44256	40.443	41.0	40
109	MID Pool Co	olumn Groups:							67.19331	67.193	68.0	67
115	MID Pool	ustom Column	*			In	port	Export	72.37389	72.374	73.0	72
121	MID Pool						poor car		74.28161	74.282	75.0	74
127	MID HI Po	Column Nar	ne 🖉 V	/isible	Number Form	at Number F	ormat Precision	LIS Supported	92.50405	92.504	93.0	92
133	MID HI Po	eiling		Ø D	lecimal	0.0			102.30208	102.302	103.0	102
139	MID HI Po	loor		D	lecimal	0			104.47659	104.477	105.0	104
_	R	ounded Calc. Conc.		D	lecimal	0.000						

Abbildung 2-11: Ergebnistabelle: Numerische Funktionen

Hinweis: In diesem Beispiel verwendet die Funktion ROUND drei Dezimalstellen, wie angezeigt in der Formel: ROUND ([Berechnete Konzentration]; 3). Die Funktion CEILING gibt die kleinste Ganzzahl zurück, die größer oder gleich Berechnete Konzentration ist. Der Wert wird als eine Dezimalstelle im Dialogfeld "Einstellungen für die Anzeige der Ergebnistabelle" konfiguriert. Die Funktion FLOOR gibt die größte Ganzzahl zurück, die kleiner oder gleich der Berechnete Konzentration ist. Der Wert wird als null Dezimalstellen im Dialogfeld "Einstellungen für die Anzeige der Ergebnistabelle" konfiguriert.

Zahlenformat

Tabelle 2-10: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Calc. Conc. Format	<pre>IF([Calculated Concentration]<1;TEXT([Ca lculated Concentration];'#0.00');I F([Calculated Concentration]<10;TEXT([C alculated Concentration];'#0.0');TE XT([Calculated Concentration];'#,###')))</pre>	Berechnete Konzentration , formatiert entsprechend den Grenzwerten für das Ergebnis.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

Textfunktionen

Verwenden der berechneten Konzentration zum Bestimmen von Peaks, die eine Überprüfung erfordern: ISNUMBER

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Calc. Conc. Review	ISNUMBER ([Calculated Concentration])	<i>true</i> wenn Berechnete Konzentration eine Zahl enthält oder <i>false,</i> wenn keine Zahl enthalten ist.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Review Peak	<pre>ISNUMBER([Calc. Conc. Review]= true; [Area];'Review Needed')</pre>	Wenn es sich bei der berechneten Konzentration um eine Zahl handelt, dann die Fläche. Wenn es sich bei der berechneten Konzentration um einen Text handelt, dann "Review Needed".	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

Index	Sample Na 🛛	Sample Type	Component Name	v Component v Type	Component Group Name	▼ Area	v Actual Concentration	Calculated Concentration	*Calc. Conc. Review	7 *Review Peak	v Exp , RT	Ret Time	Ret	lon Ratio
1	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.172e1	N/A	< 0	false	Review Needed	0.21	0.22	0.01	0.782
7	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.818e2	N/A	< 0	false	Review Needed	0.21	0.20	0.01	0.536
13	STD_01	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.501e3	4.50	1.623e0	true	9.501e3	0.21	0.21	0.00	1.177
19	STD_02	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	5.679e4	18.76	2.508e1	true	5.679e4	0.21	0.21	0.00	1.128
25	STD_03	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.128e5	37.50	5.284e1	true	1.128e5	0.21	0.21	0.00	1.217
31	STD_04	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.709e5	75.00	8.165e1	true	1.709e5	0.21	0.21	0.00	1.130
37	STD_05	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.099e5	112.50	1.010e2	true	2.099e5	0.21	0.21	0.00	1.153
43	STD_06	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.806e5	150.00	1.361e2	true	2.806e5	0.21	0.21	0.00	1.196
49	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.084e2	N/A	< 0	false	Review Needed	0.20	0.20	0.00	0.858
55	QC_Low_6040	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.162e4	8.00	7.634e0	true	2.162e4	0.21	0.21	0.00	1.119
61	QC_L1_6041	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	4.458e4	20.00	1.902e1	true	4.458e4	0.21	0.20	0.00	1.177
67	QC_L2_6042	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.282e5	60.00	6.049e1	true	1.282e5	0.21	0.20	0.00	1.126
• 73	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	N/A	N/A	N/A	false	Review Needed	0.21	N/A	N/A	N/A
79	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.354e4	N/A	3.624e0	true	1.354e4	0.21	0.20	0.00	1.174
85	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.388e4	N/A	3.793e0	true	1.388e4	0.21	0.20	0.00	1.242
91	MID LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.916e4	N/A	3.121e1	true	6.916e4	0.21	0.20	0.01	1.153
97	MID LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	8.752e4	N/A	4.031e1	true	8.752e4	0.21	0.20	0.00	1.126
103	MID LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	8.778e4	N/A	4.044e1	true	8.778e4	0.21	0.20	0.01	1.138
109	MID Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.417e5	N/A	6.719e1	true	1.417e5	0.21	0.21	0.00	1.158
115	MID Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.522e5	N/A	7.237e1	true	1.522e5	0.21	0.20	0.00	1.132
121	MID Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.560e5	N/A	7.428e1	true	1.560e5	0.21	0.20	0.01	1.116
127	MID HI Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.928e5	N/A	9.250e1	true	1.928e5	0.21	0.20	0.00	1.170
133	MID HI Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.125e5	N/A	1.023e2	true	2.125e5	0.21	0.20	0.01	1.165
139	MID HI Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.169e5	N/A	1.045e2	true	2.169e5	0.21	0.20	0.00	1.177

Abbildung 2-12: Ergebnistabelle: Calc. Conc. Review Und Review Peak

Informationen aus den Spalten für Proben-ID und Barcode extrahieren: LEFT, TRIM und RIGHT

Tabelle 2-12: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Assay	LEFT ([Sample ID];4)	Die ersten vier Zeichen (Buchstaben oder Zahlen) der Proben-ID .	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Barcode Trim	TRIM ([Barcode])	Die Inhalte der Spalte Barcode , wobei alle Leerzeichen entfernt wurden.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Req #	RIGHT ([Barcode Trim];8)	Die letzten 8 Zeichen von Barcode Trim.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

Abbildung 2-13: Ergebnistabelle: Berechnete Spalten mit den Funktionen LEFT, TRIM und RIGHT

			(1)		2	3
Sample Type 꼬	Component Type ⊽	Sample ID _ ▽	*Assay ⊽	′ Barcode ⊽	*Barcode Trim ♥	*Req# ▽
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Alprazolam 1	ABCD	AB 01234 PX	AB 01234 PX	01234 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Amphetamine 1	ABCD	AB 98020 PX	AB 98020 PX	98020 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Benzoylecgonine 1	ABCD	AB 09432 PX	AB 09432 PX	09432 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Benztropine 1	ABCD	OB 01234 DN	OB 01234 DN	01234 DN
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Bromazepam 1	ABCD	BN 01234 HD	BN 01234 HD	01234 HD
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Buprenorphine 1	ABCD	AB 000834 PX	AB 000834 PX	00834 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Cannabidiol 1	ABCD	OB 65849 DN	OB 65849 DN	65849 DN
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Cannabigerol 1	ABCD	AB 23854 PX	AB 23854 PX	23854 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Cannabinol 1	ABCD	AB 01783 PX	AB 01783 PX	01783 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Carboxy THC 1	ABCD	BN 30004 HD	BN 30004 HD	30004 HD
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Carisoprodol 1	ABCD	AB 01234 PX	AB 01234 PX	01234 PX

Element	Beschreibung
1	Die ersten vier Zeichen aus der Spalte Proben-ID .
2	Alle führenden, nachstehenden und internen Leerstellen, mit Ausnahme der einzelnen Leerstellen zwischen Zeichenfolgen, werden aus der Spalte Barcode entfernt.

Element	Beschreibung
3	Die letzten acht Zeichen aus der Spalte Barcode Trim.

Hinweis: Die Funktionen **LEFT** und **RIGHT** werden für die Verwendung mit numerischen Spalten nicht empfohlen. Die **Zahlenformat-Genauigkeit** der numerischen Werte, die im Dialogfeld "Einstellungen für die Anzeige der Ergebnistabelle" angewendet werden, wird in die Berechnung nicht einbezogen. Diese Funktionen werden auf den gesamten zugrunde liegenden Wert angewendet.

Textformat

Tabelle 2-13: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Date Format 1	TEXT([Acquisition Date & Time];'yyyy-MMMM-dd')	2022-May-04	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Date Format 2	<pre>TEXT([Acquisition Date & Time];'MM/dd/yyyy')</pre>	05/04/2022	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Date Format 3	TEXT([Acquisition Date & Time];'dddd MMM dd, yyyy')	Wednesday May 04, 2022	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

IF-Funktion

Die mittlere Fläche für interne Standards verwenden, um eine Überprüfung der Leistung des internen Standards durchzuführen

Der Mittelwert des Bereichs des internen Standards (IS) wird über die anwendbaren Proben berechnet und mit einem Wert von 1e6 verglichen. Wenn **MITTELWERT ([IS Fläche])** größer als 1e6 ist, d. h. wenn *condition* "true" ist, dann wird der mittlere Wert für die IS-Fläche in der zugehörigen Spalte der Ergebnistabelle angezeigt. Wenn **MITTELWERT ([IS Fläche])** kleiner als 1e6 ist, d. h. wenn *condition* "false" ist, dann wird **IS-Leistung überprüfen** angezeigt.

Tabelle 2-14: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
IS Performance	<pre>IF(MEAN([IS Area])>=1e6;MEAN([IS Area]);'Review IS performance')</pre>	Wenn "true", die mittlere IS- Fläche, wenn "false", der Text IS- Leistung überprüfen .	N/A	Fehler (n. z.)	N/A
Stellen Sie sicher, dass die Retentionszeit des Analyten in der unbekannten Probe mit der Retentionszeit des Kalibrierungsstandards übereinstimmt (mit einer Toleranz von ± 0,1 Minute)

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
RT_Check	<pre>IF([Sample Type]='Unknown'; IF(ABS(ME AN([Retention Time]- [Retention Time])<=0.1;'RT Pass';'RT Fail');'N/A')</pre>	Wenn die Differenz zwischen der Retentionszeit für die Probe und der Retentionszeit für den Standard mehr als 0,1 beträgt, dann RT Fail. Beträgt die Differenz weniger, dann RT Pass. Wenn es sich bei der Probe nicht um eine unbekannte Probe handelt, dann N/A.	Standards	Fehler (n. z.)	Nein
STD Mean RT	MEAN([Retention Time])	Die durchschnittliche Retentionszeit für alle Standardproben.	Standards	Ignorieren	Nein
RT delta	ABS([STD Mean RT]- [Retention Time])	Der absolute Wert der Differenz zwischen der mittleren Retentionszeit und der Retentionszeit für die Probe.	Alle	Fehler (n. z.)	Nein

Tabelle 2-15: Einstellungen

Tabelle 2-15: Einstellungen (Fortsetzung)

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
Check RT delta	<pre>IF([RT delta]>0.1;'RT Fail';'RT Pass')</pre>	Wenn die Differenz zwischen der Retentionszeit für die Probe und der Retentionszeit für die unbekannte Probe mehr als 0,1 beträgt, dann RT Fail. Beträgt die Differenz weniger, dann RT Pass.	N/A	Fehler (n. z.)	Nein
Check RT Unknowns	<pre>IF([Sample Type]='Unknown';[Check RT delta];'N/A')</pre>	Die unbekannten Proben in der Ausgabe von Check RT delta.	N/A	Fehler (n. z.)	Nein

Index	Sample Na… ⊽	Sample Type 🛛	Component _v Name	Retention Time	Used ⊽	*Unknown RT Check	*STD Mean RT ^{\(\)}	*RT delta ⊽	*Check RT delta	*Check RT Unknown
1	Solvent	Solvent	Ametryn 1	N/A		N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
12	Solvent	Solvent	Ametryn 1	N/A		N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
23	Double Blank	Double Blank	Ametryn 1	2.75		N/A	2.192	0.557	RT Fail	N/A
34	Blank	Blank	Ametryn 1	2.26		N/A	2.192	0.070	RT Pass	N/A
45	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	2.20		N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
56	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	2.19		N/A	2.192	0.003	RT Pass	N/A
67	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	2.18		N/A	2.192	0.008	RT Pass	N/A
78	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	2.19		N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
89	STD 1	Standard	Ametryn 1	2.18		N/A	2.192	0.009	RT Pass	N/A
100	STD 1	Standard	Ametryn 1	2.20		N/A	2.192	0.013	RT Pass	N/A
111	STD 10	Standard	Ametryn 1	2.20		N/A	2.192	0.007	RT Pass	N/A
122	STD 10	Standard	Ametryn 1	2.19		N/A	2.192	0.001	RT Pass	N/A
133	Double Blank	Double Blank	Ametryn 1	N/A		N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
144	Low QC	Quality Control	Ametryn 1	2.19		N/A	2.192	0.001	RT Pass	N/A
155	Medium QC	Quality Control	Ametryn 1	2.20		N/A	2.192	0.013	RT Pass	N/A
166	High QC	Quality Control	Ametryn 1	2.20		N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
177	Blank	Blank	Ametryn 1	N/A		N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
188	Unknown 1	Unknown	Ametryn 1	2.19		RT Pass	2.192	0.003	RT Pass	RT Pass
199	Unknown 1	Unknown	Ametryn 1	2.18		RT Pass	2.192	0.010	RT Pass	RT Pass
210	Unknown 2	Unknown	Ametryn 1	2.20		RT Pass	2.192	0.006	RT Pass	RT Pass
221	Unknown 2	Unknown	Ametryn 1	2.20		RT Pass	2.192	0.005	RT Pass	RT Pass

Abbildung 2-14: Ergebnistabelle: STD Mean RT, RT delta, Check RT Unknown

Die Ampelleuchten für Konfidenz des Ionenverhältnisses zum Identifizieren von Peaks verwenden, die eine Revision erfordern

Die **IF**-Funktion kann verwendet werden, um eine Überprüfung der Spalten durchzuführen, die Ampelleuchten enthalten. Ampelleuchten können die folgenden Werte aufweisen: *Rot, Gelb, Grün* und *Grau*.

Tabelle 2-16: Einstellungen

Name	Formel	Ausgabe	Probentypen	Ergebnistextw erte behandeln als	Nicht verwendete Proben einschließen
MRM Ratio Fails	<pre>IF([Ion Ratio Confidence]='Red' [Ion Ratio Confidence]='Yellow' [Ion Ratio Confidence]='Grey';'Needs Revision';'Pass')</pre>	Wenn Konfidenz des Ionenverhältnisses rot, gelb oder grau ist, dann Needs Revision. Wenn nicht, dann Pass.	N/A	Fehler (n. z.)	N/A

Abbildung 2-15: Ergebnistabelle: MRM Ratio Fails

lon Ra	*MRM Ratio Fails ⊽	lon Ratio
•	NeedsRevision	N/A
•	NeedsRevision	0.6654
~	Pass	1.2094
× .	Pass	1.1556
×	Pass	1.2207
×	Pass	1.1515
× .	Pass	1.1595
× .	Pass	1.2052
-	NeedsRevision	0.7779

Eine Spalte für das bedingte Lookup enthält einen Wert, der durch den Wert einer anderen Spalte gesteuert wird, wie in einem Tabelleneintrag für das bedingte Lookup angegeben.

Einträge in der Tabelle für das bedingte Lookup enthalten folgende Informationen:

- Eine standardmäßige oder benutzerdefinierte Spalte der Ergebnistabelle
- Eine Bedingung, wie beispielsweise Equals
- Einen Lookup-Wert
- Den Ausgabewert, der in der Spalte für das bedingte Lookup in der Ergebnistabelle angezeigt wird

Wenn die Lookup-Spalte mehrere Bedingungen verwendet, dann werden die Bedingungen mit dem booleschen Operator AND (nicht OR) verwendet. Wenn die Kombination von Bedingungen "false" ist (d. h. sie weist keine Ergebnisse auf), dann wird der Wert im Feld **Standardausgabe** verwendet.

Während der Prozessierung wird für jedes bedingte Lookup eine Spalte der Ergebnistabelle erstellt. Wenn mindestens ein Ergebnis in der Spalte numerisch ist, dann ist die Spalte eine numerische Spalte und es kann ein Zahlenformat für die Spalte ausgewählt werden. Wenn keines der Ergebnisse in der Lookup-Spalte numerisch ist, dann ist die Spalte eine Textspalte.

Die Markierung kann für Spalten der Ergebnistabelle verwendet werden, die mithilfe des bedingten Lookup erstellt wurden. Diese Spalten können auch in Formeln verwendet werden.

Editor für das bedingte Lookup

Die folgende Abbildung zeigt die Oberfläche des Editors für das bedingte Lookup.

Abbildung 3-1: Editor für das bedingte Lookup

Norkflow	 Accept changes an 	id return to Calculated Columns	return to Calculated Columns 🗙 Discard (14)								
Components	2 Name	C20_1_RL_Def									
Integration	3 Description	Mark sample as 'RL' if the actual co	ncentration is equal to the Repo	irting Limit							
Library Search	4 Table Properties:	Column count 3	Row count 11	Note: Ti numeric	he "Original text" option is columns that might have r	recommended for non-numeric values.	Treat resulting text values as Error (N/A)	(5)			
Calculated Columns	Ă						ala deletera del	0			
Flagging Rules		(7)			(11)						
Advanced	Column 8 Condition	Actual Concentration	Component Name	Sample Type	Output						
	George	0.05	Ametryn 1	Standard	RL						
Formula Finder		0.05	Ametryn 2 (10)	Standard	RL						
	(12)	0.05	Atrazine 1	Standard	RL						
		0.05	Atrazine 2	Standard	RL						
		0.01	Prometon 1	Standard	RL						
		0.01	Prometon 2	Standard	RL						
		0.01	Dronazine 1	Standard	RI	*					
			(13	Default output							

Element	Beschreibung
1	Der Schritt Berechnete Spalten im Arbeitsablauf der Prozessierungsmethode. Klicken Sie auf diese Option, um die Seite "Berechnete Spalten" zu öffnen und klicken Sie dann auf Hinzufügen > Bedingtes Lookup .
2	Das Feld Name . Geben Sie einen Namen für die Formel ein.
	Tipp! Das bedingte Lookup wird nach der Prozessierung als Spalte in der Ergebnistabelle hinzugefügt. Die Kopfzeile der Spalte ist der Name des bedingten Lookup. Für eine optimale Nutzung der Bildschirmfläche empfiehlt es sich, kurze Namen zu verwenden. Ausführliche Informationen können im Feld Beschreibung hinzugefügt werden.
3	Das Feld Beschreibung . Die Beschreibung wird auf der Seite "Berechnete Spalten" angezeigt.
4	Die Anzahl der Zeilen und Spalten in der Tabelle. Um die Anzahl der Spalten und Zeilen zu ändern, geben Sie eine Zahl im Feld Spaltenzahl bzw. Zeilenzahl ein. Oder klicken Sie auf das entsprechende , um eine Spalte oder Zeile hinzuzufügen.
5	Eine Reihe von Optionen, mit denen gesteuert wird, was mit den Texteinträgen geschieht. Das Feld Ergebnistextwerte behandeln als ist wichtig in Spalten der Ergebnistabelle, die sowohl Zahlen- als auch Textausgaben enthalten können, z. B. N/A und die Symbole für ,degeneriert' und ,unendlich'. Weitere Informationen finden Sie im Abschnitt: Die Option Ergebnistextwerte behandeln als

Element	Beschreibung
6	Klicken Sie auf diese Option, um alle Zeilen auszuwählen.
7	Klicken Sie auf diese Option, um die ausgewählten Zeilen zu löschen.
8	Die Spalten, die im bedingten Lookup verwendet werden sollen. Es können benutzerdefinierte Textspalten, berechnete Spalten und Spalten für das bedingte Lookup verwendet werden.
	Hinweis: Dieses Feld besitzt ein Kontextmenü, das zum Hinzufügen, Löschen, Kopieren und Einfügen von Spalten verwendet werden kann.
9	Die Bedingung, die in der Tabelle für das bedingte Lookup verwendet werden soll. Folgende Bedingungen sind verfügbar: • Ist gleich • Ungleich
	Beginnt mit
	• Enthält
	Weniger als
	 Weniger als oder gleich
	• Mehr als
	 Größer als oder gleich
10	Der Wert, der in der Bedingungsanweisung verwendet werden soll. Der Wert muss angemessen sein für den Typ der Spalte der Ergebnistabelle. Bei dem Wert kann es sich um einen numerischen, booleschen (true oder false) oder einen Textwert handeln.
	Hinweis: Dieses Feld besitzt ein Kontextmenü, das zum Hinzufügen, Löschen, Kopieren und Einfügen von Spalten und Zeilen verwendet werden kann.
11	Der Wert oder Text, der in der Spalte für das bedingte Lookup angezeigt werden soll, wenn alle Bedingungen erfüllt werden.
	Hinweis: Dieses Feld besitzt ein Kontextmenü, das zum Hinzufügen, Löschen, Kopieren und Einfügen von Spalten und Zeilen verwendet werden kann.
12	Aktivieren Sie das Kontrollkästchen, um eine Zeile auszuwählen, die gelöscht werden soll.

Element	Beschreibung
13	Der Wert oder Text, der in der Spalte für das bedingte Lookup angezeigt werden soll, wenn keine der Bedingungen erfüllt wird.
	Hinweis: Dieses Feld besitzt ein Kontextmenü, das zum Ausschneiden, Kopieren und Einfügen von Inhalten aus diesem Feld bzw. in dieses Feld verwendet werden kann.
14	Optionen zum Speichern oder Verwerfen des bedingten Lookup.

Beispiele: Bedingtes Lookup

Beispiel: Unterer und oberer berichtbarer Grenzwert, der gesteuert wird durch den Analyten (Verbindungsname) und Probenmatrixtyp (Proben-ID)

Abbildung 3-2: Tabelle für das bedingte Lookup: Ausgabe-Wert, der auf einen niedrigeren berichtbaren Grenzwert in Bezug auf den Analyten und den Probenmatrixtyp festgelegt wird

mponents	Name	LRL					
tegration	Description	Indicate the lower reportable	limit depend	ling on the	e matrix type and ana	lyte	
brary Search	Table Properties:	Column count 2	- R	ow count	45 🕂	Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.	Treat resulting text values as Original text
alculated Columns 🔹 🕨	Select All Rows	Delete Selected Rows					
agging Rules	Column	Component Name	Sample I	D 🗸			
dvanced	Condition	Equals	Equals	~	Output		
		BZE 1	Urine		0.01	â	
Formula Finder		BZE 1	Serum		0.025		
		BZE 1	Oral Fluid	1	0.01		
Non-targeted Peaks		BZE 1	Hair		0.025		
		Cocaethylene 1	Urine		0.001		
		Cocaethylene 1	Serum		0.0025		
		Cocaethylene 1	Oral Fluid	i	0.001		
		Cocaethylene 1	Hair		0.0025		
		Cocaine 1	Urine		0.001		
		Cocaine 1	Serum		0.001		
		Cocaine 1	Oral Fluid	i	0.001		
		Cocaine 1	Hair		0.001		
		m-OH-BZE 1	Urine		0.01		
		m-OH-BZE 1	Serum		0.05		
		m-OH-BZE 1	Oral Fluid	1	0.025		
		m-OH-BZE 1	Hair		0.05	v	
			Defaul	t output			

Abbildung 3-3: Tabelle für das bedingte Lookup: Ausgabe-Wert, der auf einen höheren berichtbaren Grenzwert in Bezug auf den Analyten und den Probenmatrixtyp festgelegt wird

ponents	Name	URL								
gration	Description	Indicate the upper reportable	icate the upper reportable limit depending on the matrix type and analyte							
ry Search	Table Properties:	Column count 2	Row cour	nt 45 🕂	Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.	Treat resulting text values as				
Ilated Columns 🔹 🕨						original text				
	Select All Rows	Delete Selected Rows								
ing Rules	Column	Component Name	Sample ID 💙							
nced	Condition	Equals	Equals 💙	Output						
locu		BZE 1	Urine	1000	a					
rmula Finder		BZE 1	Serum	100						
		BZE 1	Oral Fluid	10						
on-targeted Peaks		BZE 1	Hair	1						
		Cocaethylene 1	Urine	1000						
		Cocaethylene 1	Serum	100						
		Cocaethylene 1	Oral Fluid	10						
		Cocaethylene 1	Hair	1						
		Cocaine 1	Urine	1000						
		Cocaine 1	Serum	100						
		Cocaine 1	Oral Fluid	10						
		Cocaine 1	Hair	1						
		m-OH-BZE 1	Urine	10						
		m-OH-BZE 1	Serum	10						
		m-OH-BZE 1	Oral Fluid	5						
		m-OH-BZE 1	Hair	1						
			Default output							

Component Name	▼ Sample ID マ	Sample Type T	Calculated Concentration ♥	*LRL ⊽	*URL ⊽
Ecgonine 1	Oral Fluid	Unknown	0.062	0.050	1.000
EME 1	Oral Fluid	Unknown	0.054	0.075	1.000
BZE 1	Oral Fluid	Unknown	0.052	0.010	1.000
Norcocaine 1	Oral Fluid	Unknown	0.053	0.003	0.010
Cocaine 1	Oral Fluid	Unknown	0.054	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Oral Fluid	Unknown	0.061	0.001	0.100
Ecgonine 1	Hair	Unknown	0.058	0.750	2.000
EME 1	Hair	Unknown	0.041	0.100	2.000
BZE 1	Hair	Unknown	0.055	0.025	1.000
Norcocaine 1	Hair	Unknown	0.056	0.005	0.100
Cocaine 1	Hair	Unknown	0.058	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Hair	Unknown	0.063	0.003	0.100
Ecgonine 1	Urine	Unknown	0.077	0.050	1.000
EME 1	Urine	Unknown	0.077	0.075	1.000
BZE 1	Urine	Unknown	0.084	0.010	1.000
Norcocaine 1	Urine	Unknown	0.088	0.003	0.010
Cocaine 1	Urine	Unknown	0.096	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Urine	Unknown	0.097	0.001	0.100
Ecgonine 1	Serum	Unknown	0.079	0.750	2.000
EME 1	Serum	Unknown	0.065	0.100	2.000
BZE 1	Serum	Unknown	0.083	0.025	1.000
Norcocaine 1	Serum	Unknown	0.086	0.005	0.100
Cocaine 1	Serum	Unknown	0.092	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Serum	Unknown	0.102	0.003	0.100

Abbildung 3-4: Ergebnistabelle: LRL und URL Spalten für das bedingte Lookup

SCIEX OS Software Berechnete Spalten

Beispiel: Der für die berechneten Konzentrationen unbekannter Proben (Probentyp) zu verwendende Verdünnungsfaktor, der durch den Probenmatrixtyp (Proben-ID) gesteuert wird

Abbildung 3-5: Tabelle für das bedingte Lookup: Ausgabe-Wert, der auf einen Verdünnungsfaktor in Bezug auf den Probenmatrixtyp festgelegt wird

Name	x Dil. Factor						
Description	Dilution Factor appl	ied to differe	nt matrice	5			
					Note: The "Original text" option is recommended for	Treat resulting text v	alues as
Table Properties:	Column count 2		Ro	w count 3	numeric columns that might have non-numeric values.	Original text	~
Select All Rows	Delete Selected F	lows					
Column	Sample Type	Sample I	D 👻	Output			
Condition	Equals	Equals	~	Output			
	Unknown	Oral Fluid		3			
	Unknown	Hair		2			

 Accept chang 	changes and return to Calculated Columns 💦 X Discard									
Formula name	Corrected Conc.									
Description	on Recalculates Calculated Concentration of unknown samples based on dilution factor									
COUNT	MAX	STDEV	Clear	[Calculated Concentration]*[Dil. Factor]					
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF)							1.0
LEFT	RIGHT	ISNUMBER	+	Columns x x	Regression parame	ters				
1			=	x Dil. Factor	1	Ă				
Note: The "Orig that contain fun non-numeric va Treat resulting to	inal text" option is rec ctions, such as the IF lues to numeric value ext values as Error	commended for form function, that comp s. (N/A)	nulas are 💙	XIC Width (ppm)	Intercept Quadratic coefficient Linear coefficient Constant term	Ψ				
							Process & Close	Print	Close	Help

Abbildung 3-6: Formel: Die Spalte für das bedingte Lookup, die angewendet wird auf Berechnete Konzentration

Component Name	Sample ID ⊽	Sample Type 🔻	Calculated Concentration ♥	*x Dil. Factor ⊽	*Corrected Conc. ♥	*LRL ⊽	*URL ⊽
Ecgonine 1	Oral Fluid	Unknown	0.062	3.000	0.185	0.050	1.000
EME 1	Oral Fluid	Unknown	0.054	3.000	0.162	0.075	1.000
BZE 1	Oral Fluid	Unknown	0.052	3.000	0.157	0.010	1.000
Norcocaine 1	Oral Fluid	Unknown	0.053	3.000	0.160	0.003	0.010
Cocaine 1	Oral Fluid	Unknown	0.054	3.000	0.162	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Oral Fluid	Unknown	0.061	3.000	0.182	0.001	0.100
Ecgonine 1	Hair	Unknown	0.058	2.000	0.117	0.750	2.000
EME 1	Hair	Unknown	0.041	2.000	0.082	0.100	2.000
BZE 1	Hair	Unknown	0.055	2.000	0.109	0.025	1.000
Norcocaine 1	Hair	Unknown	0.056	2.000	0.111	0.005	0.100
Cocaine 1	Hair	Unknown	0.058	2.000	0.117	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Hair	Unknown	0.063	2.000	0.126	0.003	0.100
Ecgonine 1	Urine	Unknown	0.077		N/A	0.050	1.000
EME 1	Urine	Unknown	0.077		N/A	0.075	1.000
BZE 1	Urine	Unknown	0.084		N/A	0.010	1.000
Norcocaine 1	Urine	Unknown	0.088		N/A	0.003	0.010
Cocaine 1	Urine	Unknown	0.096		N/A	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Urine	Unknown	0.097		N/A	0.001	0.100
Ecgonine 1	Serum	Unknown	0.079		N/A	0.750	2.000
EME 1	Serum	Unknown	0.065		N/A	0.100	2.000
BZE 1	Serum	Unknown	0.083		N/A	0.025	1.000
Norcocaine 1	Serum	Unknown	0.086		N/A	0.005	0.100
Cocaine 1	Serum	Unknown	0.092		N/A	0.001	0.100
Cocaethylene 1	Serum	Unknown	0.102		N/A	0.003	0.100

Abbildung 3-7: Ergebnistabelle: Angepasste berechnete Konzentration

Die **Zahlenformat-Genauigkeit** der numerischen Werte, die im Dialogfeld "Einstellungen für die Anzeige der Ergebnistabelle" angewendet werden, wird in mathematischen Formeln nicht berücksichtigt. Formeln werden auf den gesamten zugrunde liegenden Wert angewendet.

Dasselbe gilt für den Vergleich numerischer Werte. Wenn ein bedingtes Lookup auf eine Zahl in der Ergebnistabelle angewendet wird, dann muss die Zahl in der Tabelle für das bedingte Lookup identisch sein mit dem gesamten zugrunde liegenden Wert, und zwar mit mindestens 15 gültigen Stellen. Wenn der Vergleich mit der in der Ergebnistabelle angezeigten Zahl erfolgt, dann gibt es möglicherweise keine Übereinstimmung.

Abbildung 3-8: Zahlenformat-Genauigkeit=2



lame	Numeric Comparison				
escription	Comparing numeric va	alue in lookup table v	vith Results Table values		
able Properties:	Column count 2	e Ro	ow count 3	Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.	Treat resulting text values Original text
Select All Rows	Delete Selected Rov	NS		1	
olumn	Component V	Expected RI	Output		
onation	Methadone 105	2.38	On time		
	Tapentadol 107	1.86	On time		
		Default output]	
				-	

Abbildung	3-9: F	Ergebnista	abelle:	Zahlenfor	mat-Gena	uiqkeit=2

Component Name ⊽	Expected RT ♥	*Numeric Comparison ♥
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	
Methadone 105	2.38	
Tapentadol 107	1.86	

Column Na	me 🗠	Visible	e Number F	Format	Number	Format Precisio	n			
xpected RT		\checkmark	Decimal		0.0000000	0000000				
 Accept changes a 	nd return to Ca	Iculated Col	umns 🗙 Discard							
Name	Numeric Co	Numeric Comparison								
Description	Comparing	numeric va	lue in lookup table v	vith Results	Table values					
						Note: The "Orioi	nal text" ont	ion is recommended for	Treat resulting t	ext values as
Table Properties:	Column co	ount 2	+ Ro	w count	3	numeric column	s that might	have non-numeric value	s. Original text	•
Column Condition	Compon Equals	nent 💙 💙	Expected RT 💙 Equals	0	utput					
	Methado	one 105	2.383	On time						
	Tapentac	dol 107	1.864	On time						
			Default output							
						Dro	core R. Clov	Drint	Class	Hele
						PTO	cess & clos	Finn	Close	neip

Abbildung 3-10: Formel: Zahlenformat-Genauigkeit=3

Component Name 5	Expected RT ∇	*Numeric Comparison ⊽
Methadone 105	2.3830000000000	On time
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time

Abbildung 3-11: Ergebnistabelle: Zahlenformat-Genauigkeit=3

Funktion	Beschreibung
ABS	Gibt den Absolutwert der festgelegten Zahl zurück.
	Syntax:
	ABS (<i>n</i>)
	Beispiel: ABS (-1)
ACOS	Gibt den Winkel mit dem Kosinus zurück, bei dem es sich um den Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl handelt. Die ACOS -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	ACOS (n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Kosinus, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
ASIN	Gibt den Winkel mit dem Sinus zurück, bei dem es sich um den Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl handelt. Die ASIN -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	ASIN(n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Sinus, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.

Funktion	Beschreibung
ATAN	Gibt den Winkel mit dem Arkustangens zurück, bei dem es sich um den Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl handelt. Die ATAN -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	ATAN (n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Arkustangens, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
CEILING ²³	Gibt die kleinste Ganzzahl zurück, die größer oder gleich dem Wert in der Spalte der Ergebnistabelle oder der angegebenen Zahl ist.
	Syntax:
	CEILING ([Results Table column])
	Beispiel: CEILING ([Calculated Concentration])
COS	Gibt den Kosinus eines Winkels zurück, der als Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann. Die COS -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	COS (<i>n</i>)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Winkel, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
ANZAHL	Gibt die Zahl der Elemente in einem Satz zurück.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

² Die Funktion kann für Funktionen innerhalb von Funktionen und mit benutzerspezifischen Zahlen verwendet werden.

³ Die vom Benutzer ausgewählte Spalte, auf die diese Funktionen angewendet werden, muss im Zahlenformat sein.

Funktion	Beschreibung
EXP	Gibt <i>e</i> potenziert mit der angegebenen Zahl zurück, wobei es sich um den Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder den angegebenen Wert handeln kann.
	Syntax:
	EXP(n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist die Potenz, die als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
	Hinweis: Wenn die Potenz höher als 709 ist, dann wird n. z. angezeigt.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
FIND ⁴	Gibt die Position der angegebenen Zeichen im Text einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle zurück.
	Syntax:
	<pre>FIND(`search string';[Results Table column];n)</pre>
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>Suchzeichenfolge</i> ist der zu suchende Text oder numerische Wert.
	• <i>n</i> ist die Zeichenposition, von der aus die Zählung für ein Textsegment beginnt.
	Hinweis:
	• Die Funktion FIND kann in einer FIND -Funktion oder einer anderen Funktion verwendet werden.
	 Wenn die Funktion FIND in einer FIND-Funktion verwendet wird, dann wird die innere FIND zuerst ausgeführt. Die nachfolgende Position wird als Startindex für die äußere FIND verwendet.
	 Wenn die innere FIND einen ungültigen Wert zurückgibt, d. h. wenn die Suchzeichenfolge nicht gefunden wird, dann wird die Formel als ungültig behandelt und die für Ergebnistextwerte behandeln als ausgewählte Option steuert den Ausgabewert.
	• Wenn die Funktion FIND auf einen ungültigen Eintrag angewendet wird und Ergebnistextwerte behandeln als auf Originaltext festgelegt ist, dann wird n. z. in der entsprechenden Spalte der Ergebnistabelle angezeigt.
	Die Funktion FIND unterstützt keine Platzhalter.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

⁴ Bei in dieser Funktion verwendetem Text muss die Groß-/Kleinschreibung beachtet werden.

Funktion	Beschreibung
FLOOR ^{2 3}	Gibt die größte Ganzzahl zurück, die kleiner oder gleich der Zahl in der angegebenen Spalte der Ergebnistabelle oder der angegebenen Zahl ist.
	Syntax:
	FLOOR ([Results Table column])
	Beispiel: FLOOR([Calculated Concentration])
GET	Gibt den Wert für die festgelegte Komponente zurück.
	Syntax:
	<pre>GET([Results-Table-column]; 'Component- Name')</pre>
GETGROUP	Gibt den Wert für den festgelegten Übergang in einer Gruppe zurück.
	Syntax:
	GETGROUP ([Results-Table-column]; n)
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>n</i> ist die Nummer des Übergangs in der Gruppe.
	Hinweis: Wenn im Abschnitt "Komponenten" keine Gruppen identifiziert werden, behandelt die GETGROUP -Funktion alle Komponenten als Mitglieder der gleichen Gruppe.
GETSAMPLE ^{5 6}	Gibt die Werte einer standardmäßigen oder
	benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle für die Probe des ausgewählten Typs zurück.
	Syntax:
	GETSAMPLE ([Results Table column];'Sample Name')
	Beispiel: GETSAMPLE([Area]; 'Low QC')

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

⁵ Wenn mehrere Proben denselben *Probennamen* aufweisen, dann liefert die Software Daten der ersten prozessierten Probe, die eine Übereinstimmung aufweist.

⁶ Wenn der angegebene *Probenname* in der Ergebnistabelle nicht gefunden wird, dann wird das Ergebnis über die für **Ergebnistextwerte behandeln als** ausgewählte Option gesteuert.

Funktion	Beschreibung
GETSAMPLECLOSEST ^{7 8 9 10}	Gibt den Wert einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle für die Probe des ausgewählten Typs zurück, dessen Wert dem benutzerdefinierten Wert am nächsten ist.
	Syntax:
	GETSAMPLECLOSEST ([Results Table column 1]; [Results Table column 2])
	Wobei Folgendes gilt:
	• Spalte 1 der Ergebnistabelle ist der Ausgabewert.
	• Spalte 2 der Ergebnistabelle ist der Eingabewert.
	<pre>Beispiel¹²: GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio]; [Area])</pre>
GETSAMPLECLOSESTLOW ⁷⁸ 9 10 11	Gibt den Wert einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle für die am nächsten gelegene Probe des ausgewählten Typs zurück, dessen Wert kleiner oder gleich dem benutzerdefinierten Wert ist.
	Syntax:
	GETSAMPLECLOSESTLOW ([Results Table column 1]; [Results Table column 2])
	Wobei Folgendes gilt:
	• Spalte 1 der Ergebnistabelle ist der Ausgabewert.
	• Spalte 2 der Ergebnistabelle ist der Eingabewert.
	<pre>Beispiel¹²: GETSAMPLECLOSESTLOW([Ion Ratio]; [Area])</pre>

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

⁷ Der Eingabewert muss eine numerische Spalte sein.

⁸ Die Funktion verwendet die Präzision des numerischen Wertes in den gespeicherten Daten für den Vergleich, nicht die in der Ergebnistabelle konfigurierte Präzision.

⁹ Wenn mehrere prozessierte Proben denselben Eingabewert aufweisen, dann liefert die Software Daten der ersten prozessierten Probe, die eine Übereinstimmung aufweist.

 ¹⁰ Wenn der angegebene Eingabewert in der Ergebnistabelle nicht gefunden wird, dann wird das Ergebnist über die für Ergebnistextwerte behandeln als ausgewählte Option gesteuert.

¹¹ Die Auswahl des Probentyps ist für den Eingabewert verfügbar.

¹² Zeilenumbrüche sind in Formeln nicht zulässig. Wenn eine Formel in das Formel-Feld eingefügt wird, dann entfernen Sie die Zeilenumbrüche.

Funktion	Beschreibung
GETSAMPLECLOSESTHIGH ^{7 8} 9 10 11	Gibt den Wert einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle für die am nächsten gelegene Probe des ausgewählten Typs zurück, dessen Wert größer oder gleich dem benutzerdefinierten Wert ist.
	Syntax:
	GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Results Table column 1]; [Results Table column 2])
	Wobei Folgendes gilt:
	• Spalte 1 der Ergebnistabelle ist der Ausgabewert.
	• Spalte 2 der Ergebnistabelle ist der Eingabewert.
	<pre>Beispiel¹²: GETSAMPLECLOSESTHIGH([Ion Ratio]; [Area])</pre>
GETSAMPLEEQUAL 7 8 9 10 11	Gibt den Wert einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle für die Probe des ausgewählten Typs zurück, dessen Wert dem benutzerdefinierten Wert entspricht.
	Syntax:
	GETSAMPLEEQUAL ([Results Table column 1]; [Results Table column 2])
	Wobei Folgendes gilt:
	• Spalte 1 der Ergebnistabelle ist der Ausgabewert.
	• Spalte 2 der Ergebnistabelle ist der Eingabewert.
	<pre>Beispiel: GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio]; [Area])</pre>

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
GETSTAT	Fügt die Spalte Mittelwert , Standardabweichung , Prozent VK oder Durchschnittliche Genauigkeit für Replikate , die im Fensterteil "Statistiken" angezeigt werden, zur Ergebnistabelle hinzu.
	Syntax:
	<pre>GETSTAT('Statistics-pane- column';'Metric';'Grouping')</pre>
	Wobei Folgendes gilt:
	 Statistics-pane-column muss exakt mit dem Namen der Spalte wie im Teilfenster "Statistiken" angezeigt übereinstimmen.
	 Metrik ist die Eigenschaft, wofür die Statistik berechnet wird. Statistiken können für Berechnete Konzentration, Fläche, Höhe und Y-Wert der Kalibrierung berechnet werden.
	 (Optional) <i>Gruppierung</i> gibt an, wie die Proben für einen Analyten für die Berechnung der Statistiken in Gruppen eingeteilt werden. Die folgenden Optionen sind verfügbar: Ist-Konzentration, Probenname, Proben-ID, Probennamen-Präfix, Probenkommentar, Barcode, Gescannter Barcode und Injektionsposition. Wenn keine Gruppierungsoption festgelegt ist, dann wird Ist- Konzentration verwendet.
	Hinweis: Wenn keine Gruppierungsoption ausgewählt ist, dann extrahiert GETSTAT statistische Werte (Mittelwert, Standardabweichung, %VK und durchschnittliche Genauigkeit für Replikate) für Standard- und QC Probentypen, gruppiert nach Ist- Konzentration.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
GETVALUE ⁸	Vergleicht die Werte in zwei Spalten der Ergebnistabelle oder den Wert einer Spalte der Ergebnistabelle und einen benutzerspezifischen Wert. Wenn die Werte identisch sind, dann gibt die Funktion den Wert einer dritten Spalte der Ergebnistabelle zurück. Die GETVALUE -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	GETVALUE ([Results Table Column 1)];n1; [Results Table Column 2)]
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>Spalte 1 der Ergebnistabelle</i> ist die Spalte, von der die Funktion den Wert zurückgibt, wenn <i>n1</i> identisch ist mit <i>Spalte 2 der Ergebnistabelle</i> .
	 n1 ist die Spalte oder ein benutzerdefinierter Wert zur Verwendung im Vergleich. n1 kann eine Spalte der Ergebnistabelle, eine berechnete Spalte, eine benutzerdefinierte Textspalte, eine Zahl oder ein Text sein. Spalten müssen in Klammern eingeschlossen sein: []. Text muss in einfachen Anführungszeichen eingeschlossen sein. Zahlen dürfen nicht in Anführungszeichen eingeschlossen sein.
	• <i>Spalte 2 der Ergebnistabelle</i> ist eine Spalte der Ergebnistabelle, eine berechnete Spalte oder eine benutzerdefinierte Textspalte zur Verwendung im Vergleich.
	Hinweis:
	 Wenn mehr als eine Probe denselben Eingabewert aufweist, dann gibt die Funktion die Daten der ersten Probe zurück, die prozessiert wird.
	 Wenn die Eingabewerte in der Ergebnistabelle nicht gefunden werden, dann wird das Ergebnis über die für Ergebnistextwerte behandeln als ausgewählte Option gesteuert.
	 Die Auswahl des Probentyps ist f ür den Eingabewert verf ügbar.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
IEEEREMAINDER	Gibt den Rest zurück, der sich aus der Division einer Spalte der Ergebnistabelle oder benutzerdefinierten Zahl durch eine Spalte der Ergebnistabelle oder eine benutzerdefinierte Zahl ergibt. Die IEEEREMAINDER - Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	IEEEREMAINDER (<i>n</i> 1; <i>n</i> 2)
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>n1</i> ist der Dividend, oder die Zahl, die dividiert werden soll, der/die als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
	 n2 ist der Divisor, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
IF	Führt einen logischen Test durch und gibt dann als Ergebnis "true" oder "false" zurück. Testen Sie mit verschachtelten IF -Funktionen mehr als eine Bedingung. Die IF -Funktion kann mit anderen logischen Funktionen wie und und oder kombiniert werden, um einen logischen Test zu erweitern.
	Syntax:
	<pre>IF(condition;value if true;value if false)</pre>
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>condition</i> ist ein Wert oder ein logischer Ausdruck, der wahr oder falsch sein kann.
	• <i>value if true</i> ist ein Wert, der in der Spalte der Ergebnistabelle angezeigt werden soll, wenn <i>condition</i> wahr ist.
	• <i>value if false</i> ist ein Wert, der in der Spalte der Ergebnistabelle angezeigt werden soll, wenn <i>condition</i> falsch ist.
	Hinweis: Das Symbol der IF -Funktion kann über den Rechner ausgewählt, eingegeben oder aus einer anderen Quelle kopiert werden. Bei der IF -Funktion muss die Groß-/Kleinschreibung nicht beachtet werden.
	Hinweis: Die Zeichen && und können für und und oder verwendet werden. Die Operatoren und und oder müssen von Leerzeichen umgeben sein, die Operatoren && und jedoch nicht.
	Die numerischen Funktionen können in einer Formel mit einer IF -Funktion verwendet werden. Numerische Funktionen wie beispielsweise MEAN und STDEV können verwendet werden in der Ausdrücken <i>condition</i> , <i>value if true</i> oder <i>value if false</i> .
	IF-Bedingungen können die Testkonfidenz-Ampeln für diese Spalten testen:
	Masse/Konfidenz
	Fragmentmassenfehler-Konfidenz

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
	• RT-Konfidenz
	Isotop/Konfidenz
	Bibliothek/Konfidenz
	Formel/Konfidenz
	Kombinierte Regeln
	Konfidenzampeln können für die Werte Grün , Gelb , Rot , oder Grau getestet werden.
IN	Stellt fest, ob ein Element sich in einer Reihe von Werten befindet. Wenn sich das Element in der Reihe befindet, dann wird true ausgegeben. Wenn sich das Element nicht in der Reihe befindet, dann wird false ausgegeben.
	Syntax:
	<pre>IN ([Results Table column] number string function; value 1;value 2;value 3)</pre>
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>Results Table column, number, string</i> oder <i>function</i> wird angegeben, um eine Spalte der Ergebnistabelle, Zahl, Textzeichenfolge oder Funktion zu suchen.
	 Wert 1;Wert 2;Wert 3 ist eine Liste mit bis zu 100 Werten, die in der Reihe gefunden werden. Werte können Zahlen, Text oder Funktionen sein.
	Beispiel: IN([Actual Concentration]; 1;2;3)

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
INTERCEPT	Gibt den Punkt zurück, an dem sich das Diagramm einer Funktion oder Beziehung mit der gegenüberliegenden Achse des Koordinatensystems überschneidet.
	Syntax:
	• INTERCEPT ([X-value]; [Y-value])
	• INTERCEPT ([Y-value])
	Hinweis: Ist nur ein Wert festgelegt, dann wird er als <i>Y-Wert</i> und Ist-Konzentration als <i>X-Wert</i> verwendet.
	INTERCEPT bezieht sich auf eine lineare Regression ($y = ax + b$).
ISNUMBER	Identifiziert einen Wert in einer Zelle in der Ergebnistabelle als numerisch oder nichtnumerisch. Wenn es sich bei dem Wert um eine Zahl handelt, dann wird true ausgegeben. Wenn es sich bei dem Wert nicht um eine Zahl handelt, dann wird false ausgegeben.
	Syntax:
	ISNUMBER ([Results Table column])
	Beispiel ¹² : ISNUMBER([Calculated Concentration])
	Hinweis:
	Wenn ISNUMBER in komplexen Anweisungen verwendet wird, beispielsweise mit einer IF -Funktion, dann muss das Ergebnis (true oder false) klein geschrieben sein und darf nicht in Anführungszeichen stehen.
	<pre>Beispiel: IF(ISNUMBER([Area]) = true; 'compound present'; 'compound not present')</pre>

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
LEFT ^{13 14 15}	Gibt eine festgelegte Anzahl von Zeichen vom Anfang des Textes zurück.
	Syntax:
	LEFT ([Results Table column];n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist die Anzahl der Zeichen, die zurückgegeben werden sollen.
	<pre>Beispiel: LEFT([Sample ID];4)</pre>
LOG	Gibt den Logarithmus des Wertes einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl zurück.
	Syntax:
	LOG (1;10)
LOG10	Gibt den dekadischen Logarithmus des Wertes einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl zurück.
	Syntax:
	LOG10(1)
MAD	(Mittlere absolute Abweichung) Gibt ein Maß für die Variabilität einer univariaten Probe quantitativer Daten zurück. Die MAD -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
МАХ	Gibt den größten Wert in einer Reihe zurück.
MEAN	Gibt die Summe einer Liste von Zahlen dividiert durch die Anzahl der Zahlen in der Liste zurück.
MEDIAN	Gibt den Wert zurück, der die höhere Hälfte einer Datenprobe, eine Population oder eine Wahrscheinlichkeitsverteilung von der unteren Hälfte dividiert.
MIN	Gibt den kleinsten Wert in einer Reihe zurück.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

¹³ Die Funktion kann mit anderen Funktionen verwendet werden.

¹⁴ Die Funktion kann in Zahlen-, Text- und booleschen Spalten verwendet werden.

¹⁵ Es wird empfohlen, die Funktion in Textspalten zu verwenden.

Funktion	Beschreibung
POW	Gibt eine festgelegte Zahl potenziert mit der angegebenen Zahl zurück.
	Syntax:
	POW (<i>n</i> 1; <i>n</i> 2)
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>n1</i> ist die Zahl, die potenziert werden soll, die als eine Spalte der Ergebnistabelle, als eine Funktion oder als eine Zahl angegeben werden kann.
	 n2 ist die Potenz, die als eine Spalte der Ergebnistabelle, als eine Funktion oder als eine Zahl angegeben werden kann.
	Beispiel: POW (2, 3)
	Hinweis: Wenn das Ergebnis höher als 1,7E+308 ist, dann wird n. z. angezeigt.
RIGHT ^{13 14 15}	Gibt die festgelegte Anzahl von Zeichen vom Ende des Textes zurück.
	Syntax:
	RIGHT ([Results Table Column];n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist die Anzahl der Zeichen, die zurückgegeben werden sollen.
	Beispiel: RIGHT([Barcode];3)

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
ROUND ^{2 3}	Rundet die Zahl in der angegebenen Spalte der Ergebnistabelle oder die vom Benutzer angegeben wurde zur nächstgelegenen Ganzzahl oder angegebenen Zahl der Dezimalstellen auf oder ab.
	Syntax:
	ROUND ([Results Table column];n)
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>n</i> ist die Anzahl der Dezimalstellen.
	 Wenn n > 0, dann wird die Zahl auf die angegebene Anzahl der Dezimalstellen gerundet.
	 Wenn n = 0, dann wird die Zahl auf die nächstgelegene Ganzzahl gerundet. Das heißt, es werden keine Dezimalstellen verwendet.
	 Wenn n < 0, dann wird die Zahl auf die Stelle links neben dem Dezimalzeichen gerundet.
	Beispiel: ROUND ([Calculated Concentration];0)
SEARCH ^{13 16 17}	Gibt die Position der angegebenen Zeichen im Text einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle zurück.
	Syntax:
	<pre>SEARCH('search string'; [Results Table column]};n)</pre>
	Wobei Folgendes gilt:
	Suchzeichenfolge ist der zu suchende Text oder numerische Wert.
	• <i>n</i> ist die Zeichenposition, von der aus die Zählung für ein Textsegment beginnt.
	SEARCH unterstützt die Verwendung von Platzhaltern. Siehe die Tabelle: Tabelle A-2.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Bei in dieser Funktion verwendetem Text muss die Groß-/Kleinschreibung nicht beachtet werden.

 ¹⁷ Wenn die Suchzeichenfolge nicht gefunden wird, dann wird das Ergebnis über die für Ergebnistextwerte behandeln als ausgewählten Option gesteuert. Wenn Ergebnistextwerte behandeln als auf Originaltext festgelegt wird, dann gibt die Funktion n. z. zurück.

Funktion	Beschreibung
SIGN	Gibt einen Wert zurück, der das Zeichen des Wertes einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl identifiziert. Die SIGN -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	SIGN (<i>n</i>)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist die Potenz, die als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
SIN	Gibt den Sinus eines bestimmten Winkels zurück, der als der Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben wird. Die SIN -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	SIN(n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Winkel, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
SLOPE	Gibt eine Zahl zurück, die sowohl die Richtung als auch die Steilheit der Linie identifiziert. Wird auch als <i>Gradient</i> bezeichnet.
	Syntax:
	• SLOPE ([X-value]; [Y-value])
	• SLOPE ([Y-value])
	Hinweis: Ist nur ein Wert festgelegt, dann wird er als <i>Y-Wert</i> und Ist-Konzentration als <i>X-Wert</i> verwendet.
	SLOPE bezieht sich auf eine lineare Regression ($y = ax + b$).

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)
Funktion	Beschreibung
SQRT	Gibt die Quadratwurzel des Wertes einer Spalte der Ergebnistabelle oder die angegebene Zahl zurück.
	Syntax:
	SQRT (4)
STDEV	(Standardabweichung) Gibt ein Maß zurück, das verwendet wird, um den Umfang der Variation oder Dispersion eines Satzes von Datenwerten zu quantifizieren.
SUBSTITUTE ^{4 13}	Erstellt eine Spalte in der Ergebnistabelle, die einen alphanumerischen Wert durch einen anderen alphanumerischen Wert aus einer standardmäßige oder benutzerdefinierte Spalte der Ergebnistabelle ersetzt.
	Syntax:
	SUBSTITUTE ([Results Table column];'original alphanumeric value';'new alphanumeric value';n)
	Wobei Folgendes gilt:
	 n (optional) ist das Auftreten des ursprünglichen alphanumerischen Wertes, der ersetzt wird durch den neuen alphanumerischen Wert. Wenn n festgelegt wird, dann wird nur die n-te Instanz des Wertes ersetzt. Andernfalls wird jede Instanz des alten Wertes auf den neuen Wert geändert.
	<pre>Beispiel: SUBSTITUTE([Sample Name]; `STD';'STD_00')</pre>
SUM	Gibt die Summe der Liste der Zahlen in einem Satz zurück.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung
TAN	Gibt den Tangens eines Winkels zurück, der als Wert einer Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann. Die TAN -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	TAN (<i>n</i>)
	Wobei Folgendes gilt:
	 <i>n</i> ist der Winkel, der als eine Spalte der Ergebnistabelle oder als eine Zahl angegeben werden kann.
ТЕХТ	Wendet Formatcodes auf eine Zahl an, um zu ändern, wie die Zahl angezeigt wird. Die Funktion kann verwendet werden, um Zahlen in einem besser lesbaren Format anzuzeigen oder um Zahlen, Text und Symbole zusammen zu verwenden. Die Formatierung kann auf Zahlen- oder Textspalten angewendet werden. Die Formatierung kann nicht auf boolesche Spalten angewendet werden. Die TEXT -Funktion ist auf dem Rechner nicht verfügbar, sie kann jedoch eingegeben werden.
	Syntax:
	TEXT ([Results Table Column]; `format code')
	Wobei Folgendes gilt:
	• <i>Spalte der Ergebnistabelle</i> ist die zu formatierende Spalte.
	 Formatcode steuert, wie der Inhalt der Spalte angezeigt wird. Siehe die Tabellen: Tabelle A-3 bis Tabelle A-9.

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Funktion	Beschreibung	
TRIM ¹³	Entfernt zusätzliche Leerstellen aus einem Text. Alle führenden, nachstehenden und internen Leerstellen, mit Ausnahme derer, die Wörter teilen, werden aus einer standardmäßigen oder benutzerdefinierten Spalte der Ergebnistabelle entfernt.	
	Syntax:	
	TRIM ([Results Table column])	
	Beispiel: TRIM([Barcode])	
TRUNCATE	Gibt den ganzzahligen Bestandteil einer Zahl in einer Spalte der Ergebnistabelle zurück.	
	Syntax:	
	TRUNCATE ([Results Table column])	

Tabelle A-1: Funktionen (Fortsetzung)

Tabelle A-2: Platzhalter

Platzhalter	Beschreibung		
?	Ein Fragezeichen (?) findet jedes einzelne Zeichen. Beispiel: SEARCH('?ard'; [Component Comment];1)		
	?ard findet card im Text <i>Test wild card characters (?) and (*)</i> . Die Rückgabeposition ist 11.		
	Hinweis:		
	Um nach einem Fragezeichen (?) zu suchen, geben Sie einen Backslash (\) vor dem Zeichen ein.		
	<pre>Beispiel: SEARCH('\?'; [Component Comment];1)</pre>		
	\? findet ? im Text <i>Test wild card characters (?) and (*)</i> . Die Rückgabeposition ist 28.		

Platzhalter	Beschreibung		
*	Ein Sternchen (*) findet jede Zeichensequenz. Beispiel: SEARCH('*ard';[Component Comment];1) *ard findet Test wild card im Text Test wild card characters (?) and (*). Die Rückgabeposition ist 1.		
	Hinweis:		
	Um nach einem Sternchen (*) zu suchen, geben Sie einen Backslash (\) vor dem Zeichen ein.		
	<pre>Beispiel: SEARCH('*'; [Component Comment];1)</pre>		
	* findet * im Text <i>Test wild card characters (?) and (*)</i> . Die Rückgabeposition ist 36.		

Formatcodes

Tabelle A-3: Jahr

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
00 bis 99	УУ	TEXT ([Results Table Column];'yy')	23
1900 bis 9999	УУУУ	TEXT ([Results Table Column];'yyyy')	2023

Tabelle A-4: Monat

Format	Formatcode ¹⁸	Syntax	Beispielergebni s
1 bis 12	М	TEXT ([Results Table Column];'M')	9
01 bis 12	MM	TEXT ([Results Table Column];'MM')	09
Jan bis Dez	MMM	TEXT ([<i>Results Table</i> <i>Column</i>];'MMM')	Sep

¹⁸ Beim Formatcode muss die Groß-/Kleinschreibung beachtet werden. Ein kleingeschriebenes *m* wird verwendet, um Minuten zu formatieren.

Tabelle A-4: Monat (Fortsetzung)

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
Januar bis Dezember	MMMM	TEXT ([Results Table Column];'MMMM')	September

Tabelle A-5: Tag

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
1 bis 31	d	TEXT ([Results Table Column];'d')	4
01 bis 31	dd	TEXT ([Results Table Column];'dd')	04
So bis Sa	ddd	TEXT ([Results Table Column];'ddd')	Mon
Sonntag bis Samstag	dddd	TEXT ([Results Table Column];'dddd')	Montag

Tabelle A-6: Stunden

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
0 bis 12 (12- Stunden-Uhr)	h	TEXT ([Results Table Column];'h')	9
01 bis 12 (12- Stunden-Uhr)	hh	TEXT ([Results Table Column];'hh')	09
AM oder PM (12-Stunden- Uhr)	AM/PM	TEXT ([<i>Results Table</i> <i>Column</i>];'h AM/PM')	9 PM
0 bis 24 (24- Stunden-Uhr)	Н	TEXT ([Results Table Column];'H')	21
00 bis 24 (24- Stunden-Uhr)	НН	TEXT ([Results Table Column];'HH')	09

Tabelle A-7: Minuten

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
0 bis 59	m	TEXT ([Results Table Column];'m')	7

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
00 bis 59	mm	TEXT ([Results Table Column];mm)	07

Tabelle A-7: Minuten (Fortsetzung)

Tabelle A-8: Sekunden

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
0 bis 59	S	TEXT ([Results Table Column];'s')	2
00 bis 59	SS	TEXT ([Results Table Column];ss)	02

Tabelle A-9: Zahlen

Format	Formatcode	Syntax	Beispielergebni s
Dezimalstellen	Dezimaltrennzei chen, gefolgt von einer 0 für jede erforderliche Dezimalstelle	<pre>TEXT([Results Table Column]; '#.00')</pre>	.24
Null an die Einerstelle für Zahlen kleiner als eins	0 an die Einerstelle	<pre>TEXT([Results Table Column]; `0.000')</pre>	0,245
Prozentsatz	8	TEXT ([Results Table Column];'0%')	24 %
Tausendertrennz eichen	 # oder 0 für jede Ziffer bis zur Tausenderstelle, mit dem erforderlichen Trennzeichen an der entsprechenden Position 	TEXT ([Results Table Column];#,###)	12.200.000
Wissenschaftlich e Schreibweise	E+0	<pre>TEXT([Results Table Column]; `0.0E+0')</pre>	1.2E+7

Kontakt

Kundenschulung

- In Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Die Kontaktinformationen für Länder außerhalb der EU und Nordamerikas finden Sie unter sciex.com/education.

Online-Lernzentrum

SCIEX Now Learning Hub

SCIEX Support

SCIEX und seine Vertretungen verfügen weltweit über einen Stab an voll ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Weitere Informationen erhalten Sie auf der SCIEX Website unter sciex.com, oder verwenden Sie einen der folgenden Links, um Kontakt mit uns aufzunehmen.

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/productsecurity.

Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

Um dieses Dokument elektronisch anzuzeigen, ist der Adobe Acrobat Reader erforderlich. Die neueste Version finden Sie unter https://get.adobe.com/reader.

Software-Produktdokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch.

Informationen zur Hardware-Produktdokumentation finden Sie in der mit dem System oder der Komponente gelieferten Dokumentation.

Die neuesten Versionen der Dokumentationen sind auf der Website von SCIEX unter sciex.com/customer-documents verfügbar.

Hinweis: Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an sciex.com/contact-us.