

機能ガイド

SCIEX OS ソフトウェア

計算列



本書は SCIEX 機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEX が書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

本書に記載されているソフトウェアは、使用許諾契約書に基づいて提供されています。使用許諾契約書で特に許可されている場合を除き、いかなる媒体でもソフトウェアを複製、変更、または配布することは法律で禁止されています。さらに、使用許諾契約書では、ソフトウェアを逆アセンブル、リバースエンジニアリング、または逆コンパイルすることをいかなる目的でも禁止することがあります。正当とする根拠は文書中に規定されているとおりです。

本書の一部は、他の製造業者および/またはその製品を参照することがあります。これらには、その名称を商標として登録しているおよび/またはそれぞれの所有者の商標として機能している部分を含む場合があります。そのような使用は、機器への組み込みのため SCIEX により供給された製造業者の製品を指定することのみを目的としており、その権利および/またはライセンスの使用を含む、または第三者に対しこれらの製造業者名および/または製品名の商標利用を許可するものではありません。

SCIEX の保証は販売またはライセンス供与の時点で提供される明示的保証に限定されており、また SCIEX の唯一かつ独占的な表明、保証および義務とされています。SCIEX は、明示的・黙示的を問わず、制定法若しくは別の法律、または取引の過程または商慣習から生じるかどうかに関わらず、特定の目的のための市場性または適合性の保証を含むがこれらに限定されない、他のいかなる種類の保証も行いません。これらのすべては明示的に放棄されており、購買者による使用またはそれから生じる不測の事態に起因する間接的・派生的損害を含め、一切の責任または偶発債務を負わないものとします。

研究専用。診断手順には使用しないでください。

ここに記載されている商標および / または登録商標は、関連するロゴを含め、米国および / またはその他の特定の国における AB Sciex Pte. Ltd.、またはその該当する所有者の所有物です(sciex.com/trademarks をご覧ください)。

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

目次

1 概要	4
2 式	5
式エディタ	5
単純な算術	7
より複雑な関数	7
IF 関数	8
演算子	9
結果のテキスト値を次のように扱うオプション	11
デフォルト以外の情報の簡単な抽出	11
例: 式	13
GET 関数	13
集計関数	23
数値関数	25
テキスト関数	28
IF 関数	33
3 条件付き検索	38
条件付き検索エディタ	38
例: 条件付き検索	41
A 式の参照	51
お問い合わせ先	72
お客様のトレーニング	72
オンライン学習センター	72
SCIEX サポート	72
サイバーセキュリティ	72
説明書	72

計算列とは、式または条件付き検索テーブルを使用して作成された列のことです。計算列は処理メソッドで作成されます。

処理中に、式と条件付き検索テーブルが適用され、結果は定量テーブルのカスタム列に表示されます。

注: 旧バージョンの SCIEX OS で作成された計算列が使用されている場合は、結果が正しいことを確認してください。

このドキュメントでは、計算列機能の使用方法を説明しています。

式

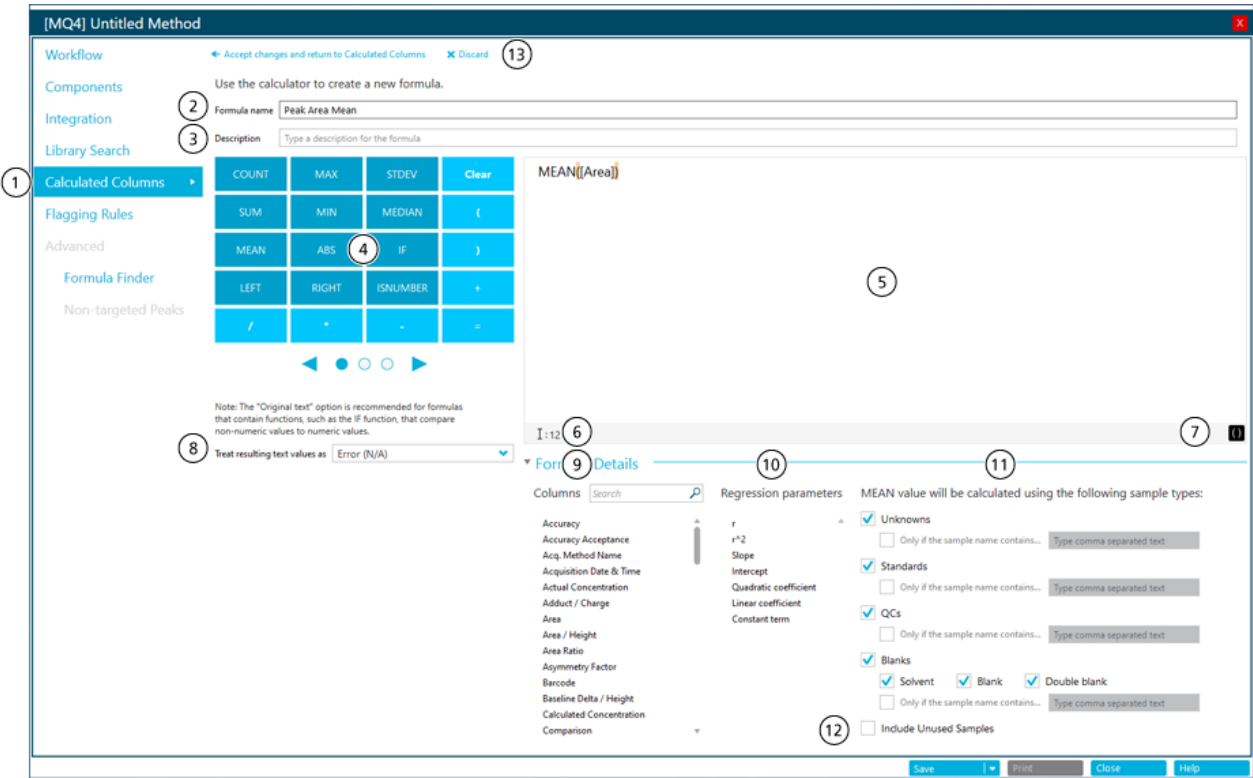
2

注: 式は `frm1` ファイルとしてインポート、エクスポートでき、後で使用したり、共有することができます。

式エディタ

次の図は、式エディタのインターフェースを示しています。

図 2-1 : 式のページ



項目	説明
1	処理方法のワークフローにおける計算列ステップ。クリックして 計算列 ページを開き、次に 追加 > 式 をクリックします。

項目	説明
2	式名フィールド。式名を入力します。 注: 式名には角括弧または丸括弧を含めることはできません。また、関数名と同じにはできません。 注: フラグ設定ルールまたは他の式で使用された式の名前は、変更できません。 ヒント! 処理後、式は定量テーブルに列として追加されます。列ヘッダーは、式の名前です。画面スペースを最大限に活用するため、式の名前は短くすることをお勧めします。説明 フィールドには詳細情報を含めることができます。 ヒント! 複数の式を含む計算の場合、式が使用される順序を指定するために、意味のある接頭語と数値を使用してください。
3	説明フィールド。説明は 計算列 ページに表示されます。 ヒント! 可能であれば、説明 に式を含めます。ユーザーが式を開いてその内容を確認する必要はありません。
4	一般的に使用される関数と演算子を含む計算機。 式の参照 および 演算子 を参照してください。
5	式フィールド。 式で使用する関数、演算子、列、値を入力または選択します。
6	Validation セクション。式 フィールドにエラーが含まれている場合、このセクションにエラーメッセージが表示されます。メッセージは、エラーが発生した位置を明らかにします。たとえば、ユーザーが次の式を入力した場合: <pre>IFS([Sample Type] == 'Standard'; 'Yes'; 'No')</pre> 以下のエラーメッセージが表示されます。 The Formula contains an invalid function at position 1: IFS. (式の 1 番目の位置に無効な関数 IFS があります。)
7	式 フィールド内の括弧にハイライトを適用するオプション。
8	テキストエントリに対して実行する処理を制御するオプションのセット。結果のテキスト値を次のように扱う フィールドは、数値とテキストの両方の出力が含まれる可能性がある定量テーブルの列において重要です。たとえば、N/A、degenerate、<0、<0、>0、not enough points、less than <i>n</i> points、および無限大の記号などです。詳細な情報については、結果のテキスト値を次のように扱うオプションを参照してください。
9	利用可能な定量テーブルの列。列をクリックして式フィールドに追加します。

項目	説明
10	利用可能な回帰パラメータ。パラメータをクリックして式フィールドに追加します。 注: 回帰パラメータは、キャリブレーションカーブ ペインにのみ表示されます。定量テーブルには列として含まれません。 注: 回帰パラメータは、線形、原点を通る線形、二次、およびゼロ点を通る線形二次回帰タイプの計算列でのみサポートされます。指数、Wagner、Hill、平均感度係数の各回帰タイプには対応していません。
11	利用可能なサンプルタイプ。関数が動作するサンプルの種類を選択します。 注: このセクションは、集計関数、つまり複数の行に対して操作を行う関数について表示されます。
12	使用 チェックボックスがオフの状態のサンプルを含めるオプション。 注: このセクションは集計関数について表示されます。デフォルトでは、集計関数を使用する計算には、使用 チェックボックスがオンの行のみが含まれます。
13	式を保存するか破棄するかのオプション。

単純な算術

単純な数式を作成して、基本的な数学演算を実行できます。

例: R^2

```
[r] * [r]
```

この例では、 R^2 の値を計算するために、 R 値をそれ自身で乗算する乗算演算子(*)が使用されています。

例: 1 秒あたりのポイントの収集

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

この例では、ベースライン全体のポイントが、積分されたクロマトグラムのピークの開始から終了までの秒数で除算されます。この数式は、除算 (/)、乗算 (*)、および減算 (-) 演算子を使用します。

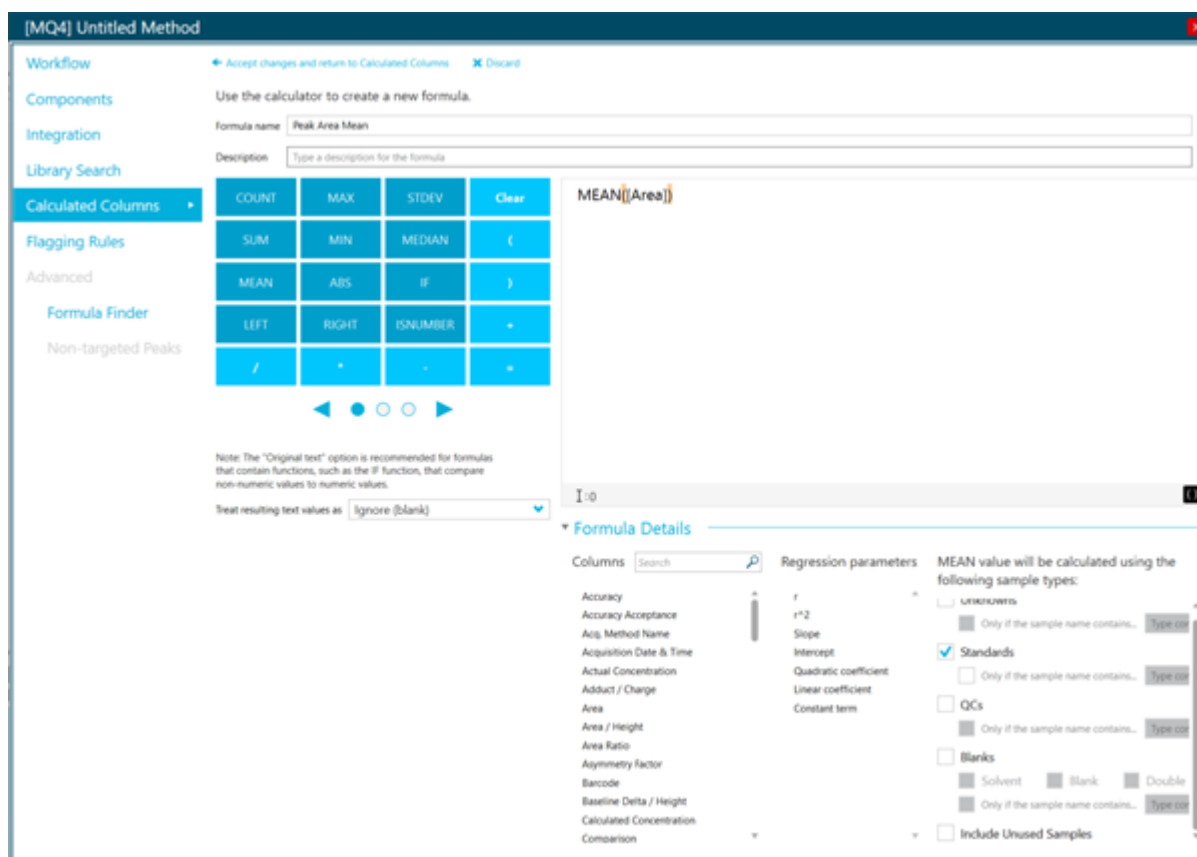
より複雑な関数

他にも多くの関数と制御構造が利用できます。一般的な関数としては、**MEAN**、**MAX**、**MIN** などがあり、計算機の数式バーの下に表示されます。構文の詳細、演算子、関数の完全なリストを表示するには、式エディタページで **F1** を押します。

例:標準の平均([面積])

すべての値を操作する関数を使用する場合、計算に含めるサンプルを選択できます。

図 2-2 : 標準サンプルのみのピーク面積の平均値を取得する



例:関数をまとめる

単純な算術とより複雑な関数をまとめることができます。たとえば、取得された 1 秒あたりの平均ポイントを計算するには、次の式を使用します。

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

注: 集計関数の組み合わせは推奨されません。集計関数ごとに別の列を作成し、それらの列を使用する式を作成します。

IF 関数

IF 関数は論理テストを行い、true または false の結果を返します。ネストされた IF 関数を使用して、複数の条件をテストします。IF 関数は、および や または などの他の論理関数と組み合わせで、論理テストを拡張できます。

基本的な IF ステートメントの構文は次のとおりです。

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

ここで:

- *condition* は、true または false として評価できる値または論理式です。
- *value if true* は、関連する定量テーブルの列に表示される値です。その場合、*condition* が true です。
- *value if false* は、関連する定量テーブルの列に表示される値です。その場合、*condition* が false です。

注: 文字 && と || は、それぞれ **および** と **または** に使用できます。演算子 **および** と **または** は前後にスペースが必要ですが、演算子 && および || には不要です。

注: IF 関数記号は、計算機から選択または入力します。または別のソースからコピーすることができます。IF 関数では、大文字と小文字が区別されません。

注: IF ステートメントでは、複数の <condition>、ユーザーが 1 つも評価しなかった場合 <condition>、次に <value if false> 出力は定量テーブルのカスタム列に表示されます。

IF 関数を使用すると、平均 や STDEV などの他の数値関数を、次の式で使用することもできます。*condition*、*value if true*、または *value if false* 式。

condition

たとえば、*condition* の例を次に示します。

```
[Area]>5000
```

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

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

value if true および value if false

この *value if true* および *value if false* は、数値またはテキストです。

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

注: 式では改行は無効です。式フィールドに式の例を貼り付けた場合は、改行を削除します。

演算子

表 2-1 : 演算子 (電卓に含まれる)

演算子	説明
/	演算子の前の値を演算子の後の値で除算します。

表 2-1 : 演算子 (電卓に含まれる) (続き)

演算子	説明
*	演算子の前の値と演算子の後の値を乗算します。
-	演算子の後の値から演算子の前の値を減算します。
=	関数の出力を表示します。
+	演算子の前の値を演算子の後の値に加算します。
()	演算順序を指定します。最初に実行する計算を括弧内に入れます。

表 2-2 : 比較演算子と論理演算子 (手動で入力可能)

演算子	説明
<	演算子の前の値が演算子の後の値より小さい場合、結果は <code>true</code> になります。それ以外の場合、結果は <code>false</code> になります。
<=	演算子の前の値が演算子の後の値以下である場合、結果は <code>true</code> になります。それ以外の場合、結果は <code>false</code> になります。
>	演算子の前の値が演算子の後の値より大きい場合、結果は <code>true</code> になります。それ以外の場合、結果は <code>false</code> になります。
>=	演算子の前の値が演算子の後の値以上である場合、結果は <code>true</code> になります。それ以外の場合、結果は <code>false</code> になります。
!=	演算子の前の値が次の値と等しくない場合、結果は <code>true</code> になります。それ以外の場合、結果は <code>false</code> になります。
&&	演算子の前後の式がともに <code>true</code> なら、結果は <code>true</code> になります。一方または両方の式が <code>false</code> の場合、結果は <code>false</code> になります。ブール型 および 演算子の文字表現。式では、 <code>&&</code> 、 <code>および</code> 、またはその両方を使用できます。
	演算子の前後いずれかの式が <code>true</code> なら、結果は <code>true</code> になります。両方の式が <code>false</code> の場合、結果は <code>false</code> になります。ブール型 または 演算子の文字表現。式では、 <code> </code> 、 <code>または</code> 、またはその両方を使用できます。
true	チェックボックスがある列の場合、チェックボックスがオンになっている列を特定します。 例 ¹ : <code>IF([Sample Type] = 'Standard'&&[Used] = true&&[Reportable] = true; 'Qualified STD reported'; '')</code>
false	チェックボックスがある列の場合、チェックボックスがオフになっている列を特定します。

¹ 式では改行は無効です。式フィールドに式を貼り付けた場合は、改行を削除します。

結果のテキスト値を次のように扱うオプション

結果のテキスト値を次のように扱う オプションは、テキストまたは数字とテキストの組み合わせを含むカスタム定量テーブル列で、テキストがどのように解釈されるかを制御します。たとえば、**サンプルタイプ**列にはテキストのみ、**プリカーサー質量**列には数値のみ、**算出濃度**列には数値とテキストの両方が含まれる場合があります。

式ごとに、ユーザーはその式で使用される関数に適用できる値に**結果のテキスト値を次のように扱う**オプションを設定できます。次の値が使用可能です。

- ゼロ
- 無視(ブランク)
- エラー(N/A)
- 元のテキスト

注: これらのオプションの詳細については、ヘルプシステムを参照してください。

以下の関数で計算を行う場合、推奨されるオプションは、**ゼロ**、**無視(ブランク)**、または **エラー(N/A)**: **COUNT**、**MAX**、**STDEV**、**SUM**、**MIN**、**MEDIAN**、**GET**、**GETGROUP**、**SLOPE**、**INTERCEPT**、**MAD**、**GETSTAT**、**GETSAMPLECLOSEST**、**GETSAMPLECLOSESTHIGH**、**GETSAMPLECLOSESTLOW**、または **GETSAMPLEEQUAL** です。これらのオプションは、数式に数値が含まれている可能性のある列がある場合、**IF** ステートメントでも推奨されます。

テキスト値の連結に推奨されるオプションは **元のテキスト** です。

例

この例では、テキスト値を含む 2 つの列を連結します。この場合、**元のテキスト**オプションを推奨します。

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

この式は、サンプルの名前とそのタイプを含む概要列を追加します。たとえば、サンプル名が *Calibrator 1*、タイプが *Standard* の場合、計算列には *Calibrator 1 Standard* が含まれます。この式では、**結果のテキスト値を次のように扱う** は **元のテキスト** に設定されます。

' ' はスペースを追加します。

デフォルト以外の情報の簡単な抽出

計算列機能を使用すると、デフォルトでは定量テーブルに表示されない情報を表示できます。

たとえば、 R^2 を定量テーブルの列として表示するには、**回帰パラメータ** リストで R^2 をクリックします。

図 2-3 : 計算列を含むカスタム列を作成する

[MQ4] Modify Method

Workflow
Components
Integration
Library Search
Calculated Columns
Flagging Rules
Advanced
Formula Finder
Non-targeted Peaks

Accept changes and return to Calculated Columns Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name:

Description:

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	{
MEAN	ABS	IF	}
LEFT	RIGHT	ISNUMBER	+
/	*	-	=

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as:

[r^2]

I:5

Formula Details

Columns:

Regression parameters

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Acq. Method Name
- Acquisition Date & Time
- Actual Concentration
- Adduct / Charge
- Area
- Area / Height
- Area Ratio
- Area Ratio of comparison
- Asymmetry Factor
- Barcode
- Baseline Delta / Height
- Calculated Concentration

r

r^2

Slope

Intercept

Quadratic coefficient

Linear coefficient

Constant term

Process & Close Print Close Help

例: 式 GET 関数

未知のサンプルに最も近い領域の標準イオン比を求めます (GETSAMPLECLOSEST)

図 2-4 : 式: Ref MRM Ratio

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Formula name: Ref MRM Ratio

Description: Find ion ratio of a standard closest in area to unknown sample

GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio];[Area])

▼ Formula Details

Columns: Search

Regression parameters: r , r^2 , Slope, Intercept, Quadratic coefficient, Linear coefficient, Constant term

GETSAMPLECLOSEST value will be calculated using the following sample types:

- ☐ Unknowns
 - ☐ Only if the sample name contains... Type comma separated text
- ☒ Standards
 - ☐ Only if the sample name contains... Type comma separated text
- ☐ QCs
 - ☐ Only if the sample name contains... Type comma separated text
- ☐ Blanks
 - ☐ Solvent ☐ Blank ☐ Double blank
 - ☐ Only if the sample name contains... Type comma separated text

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as: Error (N/A)

Process & Close Print Close Help

注: 次の表は、前図の各設定の概要を示しています。

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSEST ([Ion Ratio]; [Area])	他のサンプルの中で面積が最も近 い標準のイオン比。図 2-5 の列 1 を 参照してください。	標準	エラー (N/A)	いいえ

								(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	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、および GETSAMPLEEQUAL

表 2-4：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
High Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTHIGH([Ion Ratio];[Area])	未知のサンプルの面積以上の面積 を持つ最も近い標準のイオン比。 図 2-5 の列 2 を参照してください。	標準	エラー(N/A)	いいえ
Low Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTLOW([Ion Ratio];[Area])	未知のサンプルの面積以下の面積 を持つ最も近い標準のイオン比。 図 2-5 の列 3 を参照してください。	標準	エラー(N/A)	いいえ
Equal Ref MRM Ratio	GETSAMPLEEQUAL([Ion Ratio];[Area])	標準のみを対象とした GETSAMPLEEQUAL の結果。 図 2-5 の列 4 を参照してください。	標準	エラー(N/A)	いいえ

2 つの連続サンプルの面積を比較: 回収率とキャリーオーバーの分析のための GETVALUE

表 2-5：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Previous SampleIndex	[Sample Index]-1	定量テーブルの前のサンプルのイン デックス。	該当なし	エラー(N/A)	該当なし

式

表 2-5 : 設定 (続き)

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Previous SampleArea	GETVALUE ([Area]; [PreviousSampleIndex]; [Sample Index])	このサンプルより前に取得されたサ ンプルの成分の面積。	標準	エラー (N/A)	いいえ

図 2-6 : 定量テーブル: PreviousSampleArea

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

式

2つのトランジションの値を1つの行に移動します:GETGROUP

表 2-6 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
GET Ametryn Group CalcConc	GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 1')+ GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 2')	アメトリン 1 とアメトリン 2 の算出濃 度の合計。	不明	エラー (N/A)	いいえ
GETGROUP Qual CalcConc	GETGROUP ([Calculated Concentration]; 2)	グループ内の 2 番目のトランジショ ンの算出濃度。	不明	エラー (N/A)	いいえ

図 2-7：定量テーブル:GET Ametryn Group CalcConc と GETGROUP Qual CalcConc

Sample Type	Component Group Name	Component Name	Calculated Concentration	*GET Ametryn Group CalcConc	*GETGROUP Qual CalcConc	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

統計値をフラグ付けやレポート作成に利用できるようにする: GETSTAT

表 2-7：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
CV%STD	GETSTAT('Percent CV'; 'Calculated Concentration')	統計表の標準および QC の 算出濃 度の パーセント CV 値。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

式

表 2-7 : 設定 (続き)

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Av_RT_ Prefix	<code>GETSTAT('MEAN'; 'Retention Time'; 'Sample Name Prefix')</code>	サンプル名プレフィックス でグルー プ化されたサンプルにおける 保持 時間 の平均値。	標準	エラー (N/A)	いいえ

図 2-8 : 定量テーブル:CV%STD

Index	Sample Name	Sample Type	Actual Concentration	*CV%STD	*Av_RT_Prefix	Component Type	Area	Retention Time Delta...	Retention Time	Expec... RT	Calculated Concentration	Accuracy	Precursor Mass
12...	0.25 ng/mg hair extr_3	Standard	0.250000	0.26	4.21	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	4.21	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	4.21	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

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	Noec...	0.007500	3 of 3	0.0086871	0.0003241	3.73	115.83	0.0083630	0.0086871	0.0090111	
8	Noec...	0.010000	3 of 3	0.0113456	0.0004335	3.82	113.46	0.0108480	0.0116410	0.0115479	
9	Noec...	0.025000	3 of 3	0.0289848	0.0014867	5.13	115.94	0.0272738	0.0299608	0.0297200	
10	Noec...	0.050000	3 of 3	0.0581842	0.0014612	2.51	116.37	0.0592287	0.0565145	0.0588095	
11	Noec...	0.075000	1 of 1	0.1184153	N/A	N/A	157.89	0.1184153			
12	Noec...	0.100000	3 of 3	0.1734780	0.0897117	51.71	173.48	0.1236648	0.1197261	0.2770432	
13	Noec...	0.250000	2 of 2	0.2923103	0.0007523	0.26	116.92	0.2928423	0.2917783		
14	Noec...	0.500000	3 of 3	0.5255618	0.0067929	1.29	105.11	0.5319017	0.5263914	0.5183921	
15	Noec...	0.750000	3 of 3	0.7205283	0.0142437	1.98	96.07	0.7080770	0.7174477	0.7360602	
16	Noec...	1.000000	3 of 3	0.8710233	0.0314946	3.62	87.10	0.8636387	0.8438771	0.9055541	

式

図 2-9 : 定量テーブル:Av_RT_Prefix

Index	Sample Name	Sample Type	Actual Concentration	*CV%STD	*Av_RT_Prefix	Component Type	Area	Retention Time Delta...	Retention Time	Expec... RT	Calculated Concentration	Accuracy	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...	UnknownCX_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	7.659e7	0.00	4.10	4.10	0.0746195	N/A	304.200
10...	UnknownCX_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	8.119e7	0.01	4.09	4.10	0.0782140	N/A	304.200
10...	UnknownCX_1	Unknown	N/A	N/A	4.09	Quantifiers	8.461e7	0.02	4.09	4.10	0.0752105	N/A	304.200

Group by Sample Name prefix Sample Type All samples Metric type Retention Time Save Results and Export...													
Row	Com...	Sample Name	Num. Values	Mean	Standard Devi...	Percent CV	Value #1	Value #2	Value #3	Value #4	Value #5	Value #6	Value #7
10	Coca...	0.05 ng/mg hair extr	3 of 3	4.09	0.01	0.20	4.09	4.10	4.08				
11	Coca...	0.1 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.10	4.08	4.10				
12	Coca...	0.25 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.10	4.08				
13	Coca...	0.5 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.09	4.09	4.10				
14	Coca...	0.75 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.09	4.09				
15	Coca...	1.0 ng/mg hair extr	0 of 3	N/A	N/A	N/A	4.08	4.09	4.08				
16	Coca...	Blank hair extr	3 of 3	4.10	0.01	0.13	4.09	4.10	4.10				
17	Coca...	Postspike hair extr 0.5 ng...	1 of 1	4.11	N/A	N/A	4.11						
18	Coca...	UnknownCX	3 of 3	4.09	0.01	0.18	4.10	4.09	4.09				
19	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

集計関数

集計関数は、複数の行に対して操作を行う関数です。たとえば、**MIN** 関数は、定量テーブルのすべての行の列で最小の値を見つけます。**MEAN** 関数は、列の平均値を計算します。

表 2-8：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
STD COUNT Area	COUNT ([Area])	標準サンプルで検出された領域の 値の数	標準	無視する	いいえ
STD MAX Area	MAX ([Area])	標準サンプルの領域で検出された 最大値	標準	無視する	いいえ
STD MEAN Area	MEAN ([Area])	標準サンプルの領域の平均値	標準	無視する	いいえ
STD MEDIAN Area	MEDIAN ([Area])	標準サンプルの中央領域値	標準	無視する	いいえ
STD MIN Area	MIN ([Area])	標準サンプルの最小領域値	標準	無視する	いいえ
STD STDEV Area	STDEV ([Area])	標準サンプルの領域値の標準偏差	標準	無視する	いいえ
STD SUM Area	SUM ([Area])	標準サンプルの全領域値の合計値	標準	無視する	いいえ

式

図 2-10 : 定量テーブル:集計関数

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 ▼	*STD COUNT Area ▼
45	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	74381.256	☒	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

数値関数

表 2-9 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Rounded Calc. Conc	ROUND([Calculated Concentration];3)	算出濃度(小数点以下 3 桁に丸め られた値。)	該当なし	エラー(N/A)	該当なし
Calc. Conc Ceiling	CEILING([Calculated Concentration])	算出濃度 以上の(または等しい)最 小の整数。	該当なし	エラー(N/A)	該当なし
Calc. Conc Floor	FLOOR([Calculated Concentration])	算出濃度 以下の(または等しい)最 大の整数。	該当なし	エラー(N/A)	該当なし

式

図 2-11 : 定量テーブル:数値関数

Index	Sample Na...	Sample Type	Component Name	Component Type	Component Group Name	Area	Actual Concentration	Calculated Concentration	*Rounded Calc. Conc.	*Ceiling	*Floor
1	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.172e1	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
7	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.818e2	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
13	STD_01	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	9.501e3	4.50	1.62324	1.623	2.0	1
19	STD_02	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	5.679e4	18.76	25.07507	25.075	26.0	25
25	STD_03	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.128e5	37.50	52.83989	52.840	53.0	52
31	STD_04	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.709e5	75.00	81.65117	81.651	82.0	81
37	STD_05	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.099e5	112.50	100.99784	100.998	101.0	100
43	STD_06	Standard	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.806e5	150.00	136.07280	136.073	137.0	136
49	BLANK	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	6.084e2	N/A	< 0	N/A	N/A	N/A
55	QC_Low_6040	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	2.162e4	8.00	7.63356	7.634	8.0	7
61	QC_L1_6041	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	4.458e4	20.00	19.01736	19.017	20.0	19
67	QC_L2_6042	Quality Control	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.282e5	60.00	60.48824	60.488	61.0	60
73	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.363e4	N/A	3.67084	3.671	4.0	3
79	LO Pool	Unknown	vitd3 1	Quantifiers	vitd3	1.354e4	N/A	3.62390	3.624	4.0	3
85	LO Pool							3.79319	3.793	4.0	3
91	MID LO Po							31.20914	31.209	32.0	31
97	MID LO Po							40.31222	40.312	41.0	40
103	MID LO Po							40.44256	40.443	41.0	40
109	MID Pool							67.19331	67.193	68.0	67
115	MID Pool							72.37389	72.374	73.0	72
121	MID Pool							74.28161	74.282	75.0	74
127	MID HI Po							92.50405	92.504	93.0	92
133	MID HI Po							102.30208	102.302	103.0	102
139	MID HI Po							104.47659	104.477	105.0	104

Results Table Display Settings

Project: BIQ3

Show and hide specific columns in the results table

Column Groups:

Custom Column

Import...

Export...

Column Name	Visible	Number Format	Number Format Precision	LIS Supported
Ceiling	☒	Decimal	0.0	☐
Floor	☒	Decimal	0	☐
Rounded Calc. Conc.	☒	Decimal	0.000	☐

Column display settings are saved as a part of a layout

OK

Cancel

注: この例では、**ROUND** 関数は、**ROUND** ([算出濃度]; 3) という式で示されているように、小数点以下 3 桁を使用します。**CEILING** 関数は、**算出濃度** 以上の最小の整数を算出します。値は 定量テーブルの表示設定 ダイアログ内で小数点以下 1 桁として設定されます。**FLOOR** 関数は、**算出濃度** 以下の最大の整数を算出します。この値は、定量テーブルの表示設定 ダイアログで小数点以下 0 桁として設定されます。

数値形式

表 2-10：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Calc.Conc. Format	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];'#,###'))	算出濃度 は結果の制限値に該当す るようにフォーマットされます。	該当なし	エラー(N/A)	該当なし

式

テキスト関数

レビューが必要なピークを特定するために算出濃度を使用します: ISNUMBER

表 2-11 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Calc. Conc. Review	ISNUMBER ([Calculated Concentration])	<i>true</i> 算出濃度 に数字が含まれてい る場合、または <i>false</i> そうでない場 合。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし
Review Peak	ISNUMBER ([Calc. Conc. Review]= true; [Area]; ' Review Needed')	算出濃度が数値の場合は、面積で す。算出濃度がテキストの場合 は、"Review Needed" です。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

図 2-12: 定量テーブル: Calc. Conc. Review および Review Peak

Index	Sample Na...	Sample Type	Component Name	Component Type	Component Group Name	Area	Actual Concentration	Calculated Concentration	*Calc. Conc. Review	*Review Peak	Exp... RT	Ret... Time	Ret... Tim...	Ion 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

式

サンプル ID とバーコードの列から情報を抽出します: LEFT、TRIM、RIGHT

表 2-12 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Assay	LEFT ([Sample ID];4)	サンプル ID の最初の 4 文字 (文字 または数字) です。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし
Barcode Trim	TRIM ([Barcode])	すべてのスペースが削除された バ ーコード 列の内容。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし
Req #	RIGHT ([Barcode Trim];8)	Barcode Trim の最後の 8 文字。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

図 2-13 : 定量テーブル:LEFT、TRIM、RIGHT 関数での計算列

①				②		③
Sample Type ▼	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_Benzoyllecgonine 1	ABCD	AB 09432 PX	AB 09432 PX	09432 PX
Unknown	Quantifiers	ABCD-EE_Benzotropine 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

項目	説明
1	サンプル ID 列の最初の 4 文字。
2	文字列間の単一スペースを除き、先頭、末尾、および内部スペースはすべて、バーコード 列から削除されます。
3	Barcode Trim 列の最後の 8 文字。

式

注: **LEFT** 関数と **RIGHT** 関数は、数値列では使用しないことをお勧めします。定量テーブルの表示設定 ダイアログで適用される数値の **数値形式の精度** は計算には含まれません。これらの関数は、基礎となる値全体を操作します。

テキスト形式

表 2-13 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
Date Format 1	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'yyyy-MMMM-dd')	2022-May-04	該当なし	エラー (N/A)	該当なし
Date Format 2	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'MM/dd/yyyy')	05/04/2022	該当なし	エラー (N/A)	該当なし
Date Format 3	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'dddd MMM dd, yyyy')	Wednesday May 04, 2022	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

IF 関数

内部標準のパフォーマンスをテストするために、平均面積を使用します

該当するサンプル全体で内部標準 (IS) 面積の平均値が計算され、1e6 の値と比較されます。平均([IS の面積]) が 1e6 より大きい場合、つまり *condition* が true である場合、平均 IS 面積の値が関連する定量テーブルの列に表示されます。平均([IS の面積]) が 1e6 未満の場合、つまり *condition* が false である場合、IS パフォーマンスのレビューが表示されます。

表 2-14 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
IS Performance	IF (MEAN ([IS Area])>=1e6; MEAN ([IS Area]);'Review IS performance')	true であれば平均の IS 面積、false であればテキスト IS パフォーマンス のレビュー です。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

式

未知のサンプル中の分析種の保持時間が、キャリブレーション標準の保持時間と同じであることを確認します。許容値は ± 0.1 分です

表 2-15：設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
RT_Check	IF ([Sample Type]='Unknown'; IF (ABS (MEAN ([Retention Time]-[Retention Time])<=0.1;'RT Pass';'RT Fail');'N/A'))	サンプルの保持時間と標準品の保持時間の差が 0.1 を超える場合、RT Fail となります。0.1 を下回る場合は、RT Pass となります。サンプルが未知のものではない場合は、N/A となります。	標準	エラー(N/A)	いいえ
STD Mean RT	MEAN ([Retention Time])	すべての標準サンプルの平均保持時間です。	標準	無視する	いいえ
RT delta	ABS ([STD Mean RT]-[Retention Time])	平均保持時間とサンプルの保持時間の差の絶対値。	すべて	エラー(N/A)	いいえ
Check RT delta	IF ([RT delta]>0.1;'RT Fail';'RT Pass')	サンプルの保持時間と未知の保持時間の差が 0.1 を超える場合、RT Fail となります。0.1 を下回る場合は、RT Pass となります。	該当なし	エラー(N/A)	いいえ
Check RT Unknowns	IF ([Sample Type]='Unknown'; [Check RT delta];'N/A'))	Check RT delta の出力に含まれる未知のサンプル。	該当なし	エラー(N/A)	いいえ

図 2-14 : 定量テーブル:STD Mean RT、RT delta、Check RT Unknown

Index	Sample Na...	Sample Type	Component 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

イオン比の信頼水準 信号を使用して、修正が必要なピークを特定します

信号を含む列をテストするために、IF 関数を使用できます。信号は以下の値を取ることができます。赤、黄、緑、および グレー。

式

表 2-16 : 設定

名前	式	出力	サンプルタイプ	結果のテキスト 値を次のように 扱う	未使用のサンプ ルを含める
MRM Ratio Fails	<code>IF([Ion Ratio Confidence]='Red' [Ion Ratio Confidence]='Yellow' [Ion Ratio Confidence]='Grey'; 'Needs Revision'; 'Pass')</code>	イオン比の信頼水準 が赤、黄色、ま たはグレーの場合は、Needs Revision です。それ以外の場合 は、Pass です。	該当なし	エラー (N/A)	該当なし

図 2-15：定量テーブル:MRM Ratio Fails

Ion Ra...	*MRM Ratio Fails ▾	Ion 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

条件付き検索

3

条件付き検索列には、条件付き検索テーブル エントリで指定された別の列の値によって制御される値が含まれています。

条件付き検索テーブルのエントリには、次の情報が含まれます：

- 標準またはカスタムの定量テーブル列
- 等しいなどの条件
- 検索値
- 定量テーブルの条件付き検索列に表示される出力値

検索列で複数の条件を使用する場合、条件はブール AND (OR ではありません) 演算子で 사용됩니다。条件の組み合わせが false (つまり、結果が出ていない) の場合は、デフォルト出力 フィールドの値が使用されます。

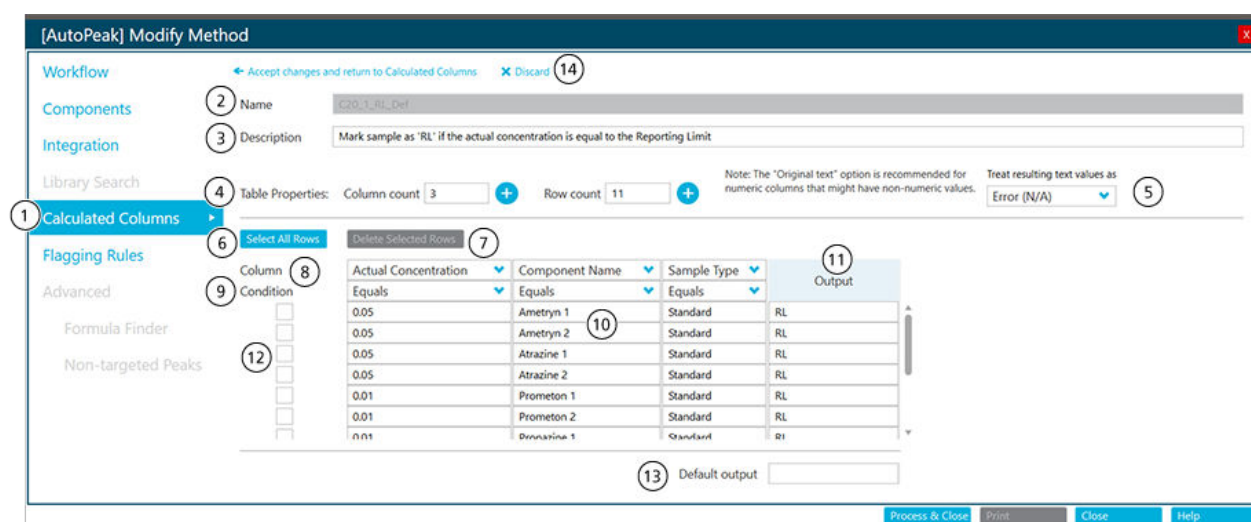
処理中、各条件付き検索に対して定量テーブルの列が作成されます。列の少なくとも 1 つの結果が数値である場合、その列は数値列であり、その列に対して数値形式を選択することができます。検索列の結果がどれも数値でない場合は、その列はテキスト列です。

フラグは、条件付き検索で作成された定量テーブルの列に使用できます。これらの列は、数式でも使用できます。

条件付き検索エディタ

次の画像は、条件付き検索エディタのインターフェースを示しています。

図 3-1：条件付き検索エディタ



項目	説明
1	処理方法のワークフローにおける 計算列 ステップ。クリックして 計算列 ページを開き、次に 追加 > 条件付き検索 をクリックします。
2	名前フィールド。式名を入力します。 ヒント! 条件付き検索は、処理後に定量テーブルの列として追加されます。列見出しは、条件付き検索の名前です。画面スペースを最大限に活用するため、名前は短くすることをお勧めします。説明 フィールドには詳細情報を含めることができます。
3	説明 フィールド。説明は 計算列 ページに表示されます。
4	テーブル内の行と列の数。列または行の数を変更するには、列数 または 行数 フィールドに数値を入力します。または、該当する  をクリックして、列または行を追加します。
5	テキストエントリに対して実行する処理を制御するオプションのセット。結果のテキスト値を次のように扱う フィールドは、N/A や劣化を示す記号や無限大の記号など、数値とテキストの両方の出力が含まれる可能性がある定量テーブルの列において重要です。詳細な情報については、結果のテキスト値を次のように扱うオプションを参照してください。
6	クリックして、すべての行を選択します。
7	クリックして、選択した行を削除します。
8	条件付き検索で使用する列。カスタムテキスト列、計算列、条件付き検索列が使用できます。 注: このフィールドには、列の追加、削除、コピー、および貼り付けに使用できる右クリックメニューがあります。
9	条件付き検索テーブルで使用する条件。利用可能な値は次のとおりです。 • 等しい • 等しくない • 次から開始 • 次を含む • 未満 • 以下 • 超 • 以上

条件付き検索

項目	説明
10	条件文で使用する値。値は、定量テーブル列のタイプに合っている必要があります。値には、数値、ブール値、(true または false)、またはテキストを指定できます。 注: このフィールドには、列と行の追加、削除、コピー、および貼り付けに使用できる右クリックメニューがあります。
11	すべての条件が満たされたときに条件検索列に表示される値またはテキスト。 注: このフィールドには、列と行の追加、削除、コピー、および貼り付けに使用できる右クリックメニューがあります。
12	削除する行のチェックボックスをオンにします。
13	どの条件も満たされないときに条件検索列に表示される値またはテキスト。 注: このフィールドには右クリックメニューがあり、このメニューを使用して、このフィールド内のコンテンツをカット、コピー、ペーストできます。
14	条件付き検索を保存するか破棄するかのオプション。

例: 条件付き検索

例: Analyte (化合物名) および Sample Matrix Type (サンプル ID) によって制御される下限値および上限値

図 3-2 : 条件付き条件付き検索: 出力分析物およびサンプル マトリックスのタイプに関連する報告可能な下限に設定された値

Workflow

Components

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

← Accept changes and return to Calculated Columns X Discard

Name

LRL

Description

Indicate the lower reportable limit depending on the matrix type and analyte

Table Properties:

Column count

2

+

Row 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

Select All Rows

Delete Selected Rows

Column

Condition

Component Name

Sample ID

Output

Equals

Equals

BZE 1

Urine

0.01

BZE 1

Serum

0.025

BZE 1

Oral Fluid

0.01

BZE 1

Hair

0.025

Cocaethylene 1

Urine

0.001

Cocaethylene 1

Serum

0.0025

Cocaethylene 1

Oral Fluid

0.001

Cocaethylene 1

Hair

0.0025

Cocaine 1

Urine

0.001

Cocaine 1

Serum

0.001

Cocaine 1

Oral Fluid

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

0.025

m-OH-BZE 1

Hair

0.05

Default output

Process & Close

Print

Close

Help

機能ガイド
RUO-IDV-05-15884-JA-A

SCIEX OS ソフトウェア 計算列
41/72

条件付き検索

図 3-3 : 条件付き条件付き検索:出力分析物およびサンプル マトリックスのタイプに関連する報告可能な上限に設定された値

Workflow
Components
Integration
Library Search
Calculated Columns
Flagging Rules
Advanced
Formula Finder
Non-targeted Peaks

Accept changes and return to Calculated Columns
Discard

Name: URL
Description: Indicate the upper reportable limit depending on the matrix type and analyte

Table Properties: Column count: 2 Row 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

Select All Rows
Delete Selected Rows

Column	Component Name	Sample ID	Output
Condition	Equals	Equals	
☐	BZE 1	Urine	1000
☐	BZE 1	Serum	100
☐	BZE 1	Oral Fluid	10
☐	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

Process & Close
Print
Close
Help

図 3-4 : 定量テーブル:LRL および URL 条件付き検索列

Component Name ▼	Sample ID ▼	Sample Type ▼	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

条件付き検索

例: サンプルマトリックスタイプ(サンプル ID)によって制御される、未知サンプル(サンプルタイプ)の計算濃度に使用される希釈係数

図 3-5 : 条件付き検索テーブル: 出力サンプルマトリックスのタイプに関連する希釈係数に設定された値

[← Accept changes and return to Calculated Columns](#) [✕ Discard](#)

Name

x Dil. Factor

Description

Dilution Factor applied to different matrices

Table Properties:

Column count

2

+

Row count

3

+

Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.

Treat resulting text values as

Original text

Select All Rows

Delete Selected Rows

Column	Sample Type	Sample ID	Output
Condition	Equals	Equals	
☐	Unknown	Oral Fluid	3
☐	Unknown	Hair	2
☐			

Default output

図 3-6 : 式:算出濃度 に適用される条件付き検索列

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Formula name:

Description:

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF	)
LEFT	RIGHT	ISNUMBER	+
/	*	-	=

◀ ● ○ ○ ▶

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as:

[Calculated Concentration]*[x Dil. Factor]

▼ Formula Details

Columns: ✕

Regression parameters

x Dil. Factor	r
XIC Width (Da)	r^2
XIC Width (ppm)	Slope
	Intercept
	Quadratic coefficient
	Linear coefficient
	Constant term

Process & Close Print Close Help

図 3-7 : 定量テーブル:調整後の計算濃度

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

定量テーブルの表示設定 ダイアログで適用される数値の **数値形式の精度** は、数式に含まれません。数式は完全な基礎となる値に基づいて動作します。

数値の比較についても同様です。条件付き検索が定量テーブル内の数値に適用される場合、条件付き検索テーブル内の数値は、有効桁数が 15 桁で、基礎となる完全な値と同じである必要があります。定量テーブルに表示されている数値と比較すると、一致しない場合があります。

図 3-8 : 数値形式の精度=2

Column Name	Visible	Number Format	Number Format Precision
Expected RT	☒	Decimal	0.00

[← Accept changes and return to Calculated Columns](#) [✕ Discard](#)

Name

Numeric Comparison

Description

Comparing numeric value in lookup table with Results Table values

Table Properties:

Column count [+](#)

Row count [+](#)

Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.

Treat resulting text values as

Original text [v](#)

Select All Rows

Delete Selected Rows

Column

Condition

Component...

Expected RT

Output

Equals

Equals

☐

Methadone 105

2.38

On time

☐

Tapentadol 107

1.86

On time

☐

Default output

Process & Close

Print

Close

Help

図 3-9 : 定量テーブル:数値形式の精度=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	

図 3-10 : 式: 数値形式の精度

Column Name	Visible	Number Format	Number Format Precision
Expected RT	☒	Decimal	0.000000000000000

[← Accept changes and return to Calculated Columns](#) [✕ Discard](#)

Name

Numeric Comparison

Description

Comparing numeric value in lookup table with Results Table values

Table Properties:

Column count [+](#)

Row count [+](#)

Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.

Treat resulting text values as

Original text [v](#)

Select All Rows

Delete Selected Rows

Column	Component... v	Expected RT v	Output
Condition	Equals v	Equals v	
☐	Methadone 105	2.383	On time
☐	Tapentadol 107	1.864	On time
☐			

Default output

Process & Close

Print

Close

Help

図 3-11 : 定量テーブル:数値形式の精度=3

Component Name ▼	Expected RT ▼	*Numeric Comparison ▼
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
Tapentadol 107	1.86400000000000	On time
Methadone 105	2.38300000000000	On time

表 A-1：機能

機能	説明
ABS	指定された数値の絶対値を取得します。 構文： ABS (<i>n</i>) 例： ABS (-1)
ACOS	定量テーブル列または指定した数値の値である余弦との角度を取得します。 ACOS の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文： ACOS (<i>n</i>) ここで： • <i>n</i> は余弦であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。
ASIN	定量テーブル列または指定した数値の値である正弦との角度を取得します。 ASIN の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文： ASIN (<i>n</i>) ここで： • <i>n</i> は正弦であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
ATAN	定量テーブル列または指定した数値の値である逆正接との角度を取得します。ATAN の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: ATAN (<i>n</i>) ここで: <i>n</i> は逆正接であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。
CEILING ^{2 3}	指定された定量テーブル列に表示される値または指定された数値以上の最小の整数を取得します。 構文: CEILING ([<i>Results Table column</i>]) 例:CEILING ([<i>Calculated Concentration</i>])
COS	角度の余弦を取得します。これは、定量テーブルの列の値または数値として指定できます。COS の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: COS (<i>n</i>) ここで: <i>n</i> は角度であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。
COUNT	セット内の項目の数を取得します。

² この関数は、関数内の関数やユーザー指定の数値に使用できます。

³ これらの関数が適用されるユーザーが選択した列は、数値形式である必要があります。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
EXP	指定した e の累乗で取得します。これは、定量テーブルの列の値または指定した数値になります。 構文: EXP (n) ここで: • n は累乗であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。 注: 累乗が 709 を超える場合は、該当なしが表示されます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
FIND ⁴	標準またはカスタムの定量テーブル列のテキスト内の指定された文字の位置を取得します。 構文: <pre>FIND('search string';[Results Table column];n)</pre> ここで: - 検索文字列は、検索するテキストまたは数値です。 <i>n</i> はテキストセグメントのカウントを開始する文字位置です。 注: FIND 関数は、FIND または他の関数で使用できます。 FIND 関数が FIND 関数で使用される場合、内部の FIND が最初に実行されます。後続の位置は、外側の FIND の開始インデックスとして使用されます。 - 内部 FIND が無効な値を指定した場合、つまり 検索文字列が見つからない場合、式は無効として扱われ、結果のテキスト値を次のように扱うに対して選択されたオプションによって出力値が制御されます。 FIND 関数が無効なエントリに適用され、結果のテキスト値を次のように扱うが元のテキストに設定されている場合、関連する定量テーブルの列に該当なしが表示されます。 FIND 関数はワイルドカード文字をサポートしていません。
FLOOR ^{2 3}	指定した定量テーブル列または指定した数値に表示される数値以下の最大整数を取得します。 構文: <pre>FLOOR([Results Table column])</pre> 例: FLOOR([Calculated Concentration])

⁴ この関数で使用するテキストは大文字と小文字が区別されます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
GET	指定された成分の値を取得します。 構文: <code>GET ([Results-Table-column]; 'Component-Name')</code>
GETGROUP	グループ内の指定した遷移の値を取得します。 構文: <code>GETGROUP ([Results-Table-column]; n)</code> ここで: • <i>n</i> は、グループ内のトランジションの数です。 注: 成分セクションでグループが指定されていない場合、 GETGROUP 関数はすべての成分を同じグループのメンバーとして扱います。
GETSAMPLE ^{5 6}	選択したタイプのサンプルの標準またはカスタムの定量テーブル列から値を取得します。 構文: <code>GETSAMPLE ([Results Table column]; 'Sample Name')</code> 例: <code>GETSAMPLE ([Area]; 'Low QC')</code>

⁵ 複数のサンプルが同じ サンプル名を持つ場合、ソフトウェアは一致のある最初の処理済みサンプルからデータを供給します。

⁶ 指定された サンプル名 が定量テーブルに見つからない場合、結果は**結果のテキスト値を次のように扱う**で選択されたオプションによって制御されます。

表 A-1：機能 (続き)

機能	説明
GETSAMPLECLOSEST ^{7 8 9 10 11}	ユーザーが指定した値に最も近い値を持つ、選択した型のサンプルの標準またはカスタムの定量テーブル列から値を取得します。 構文: <pre>GETSAMPLECLOSEST([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</pre> ここで: - 定量テーブルの列 1 は出力値です。 - 定量テーブルの列 2 は入力値です。 例¹²: GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio]; [Area])
GETSAMPLECLOSESTLOW ^{7 8 9 10 11}	ユーザー指定の値以下の値を持つ、選択したタイプの最も近いサンプルの標準またはカスタムの定量テーブル列から値を取得します。 構文: <pre>GETSAMPLECLOSESTLOW([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</pre> ここで: - 定量テーブルの列 1 は出力値です。 - 定量テーブルの列 2 は入力値です。 例¹²: GETSAMPLECLOSESTLOW([Ion Ratio]; [Area])

⁷ 入力値は数値列である必要があります。

⁸ この関数は、定量テーブルで構成された精度ではなく、保存されたデータ内の数値の精度を比較に使用します。

⁹ 複数の処理されたサンプルに同じ入力値がある場合は、一致のある最初に処理されたサンプルからデータが提供されます。

¹⁰ 指定した入力値が定量テーブルにない場合、結果は**結果のテキスト値を次のように扱う**に対して選択されたオプションによって制御されます。

¹¹ 入力値に対してサンプルタイプの選択が可能です。

¹² 式では改行は無効です。式フィールドに式を貼り付けた場合は、改行を削除します。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
GETSAMPLECLOSESTHIGH ^{7 8 9 10 11}	ユーザー指定の値以上の値を持つ、選択したタイプの最も近いサンプルの標準またはカスタムの定量テーブル列から値を取得します。 構文: <pre>GETSAMPLECLOSESTHIGH([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</pre> ここで: • 定量テーブルの列 1 は出力値です。 • 定量テーブルの列 2 は入力値です。 例 ¹²: GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio]; [Area])
GETSAMPLEEQUAL ^{7 8 9 10 11}	ユーザー指定の値と等しい値を持つ、選択したタイプのサンプルの標準またはカスタムの定量テーブル列から値を取得します。 構文: <pre>GETSAMPLEEQUAL([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</pre> ここで: • 定量テーブルの列 1 は出力値です。 • 定量テーブルの列 2 は入力値です。 例: GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio]; [Area])

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
GETSTAT	統計ペインに表示されている平均、標準偏差、パーセント CV、または複製全体の平均真度列を定量テーブルに追加します。 構文: <pre>GETSTAT('Statistics-pane-column'; 'Metric'; 'Grouping')</pre> ここで: - 統計ペインの列は、統計 ペインを表示する列の名前とまったく同じである必要があります。 - メトリックは、統計が計算されるプロパティです。統計は、算出濃度、面積、高さ、およびキャリブレーション Y 値について計算できます。 (オプション) グループ化 は、統計情報の計算のために分析種のサンプルがどのようにグループ分けされるかを指定します。以下のオプションを使用できます: 実際の濃度、サンプル名、サンプル ID、サンプル名プレフィックス、サンプルコメント、バーコード、スキャンされたバーコード、注入位置。グループ化オプションが指定されていない場合は、実際の濃度 が使用されます。 注: グループ化オプションが選択されていない場合、GETSTAT は標準および QC サンプルタイプについて、実際の濃度別にグループ化された統計値(平均、標準偏差、パーセント CV、複製全体の平均精度)を抽出します。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
GETVALUE ⁸	定量テーブルの 2 つの列の値、または定量テーブルの列とユーザー指定の値を比較します。値が同じ場合、関数は定量テーブルの 3 番目の列の値を取得します。GETVALUE の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: <pre>GETVALUE([Results Table Column 1]);n1; [Results Table Column 2)]</pre> ここで: • 定量テーブルの列 1 は、n1 が 定量テーブルの列 2 と同じ場合に関数が値を取得する列です。 • n1 は、比較に使用される列またはユーザー指定の値です。n1 は、定量テーブルの列、計算列、カスタムテキスト列、数値、またはテキストです。列は角カッコ:[] で囲む必要があります。テキストは必ず単一引用符で囲んでください。数字は引用符で囲まないでください。 • 定量テーブルの列 2 は、比較に使用する定量テーブルの列、計算列、またはカスタムテキスト列です。 注: • 複数のサンプルに同じ入力値がある場合、関数は処理される最初のサンプルからデータを取得します。 • 入力値が定量テーブルに見つからない場合、結果は 結果のテキスト値を次のように扱う で選択されたオプションによって制御されます。 • 入力値に対してサンプルタイプの選択が可能です。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
IEEEREMAINDER	定量テーブルの列またはユーザー指定の数値を定量テーブルの列またはユーザー指定の数値で除算した結果である剰余を取得します。IEEEREMAINDER の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: IEEEREMAINDER (<i>n1</i>; <i>n2</i>) ここで: • <i>n1</i> は被除数、つまり除算される数値で、定量テーブルの列または数値として指定できます。は累乗であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。 • <i>n2</i> は除数で、定量テーブルの列または数値として指定できます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
IF	論理テストを行い、true または false の結果を返します。ネストされた IF 関数を使用して、複数の条件をテストします。IF 関数は、およびやまたはなどの他の論理関数と組み合わせて、論理テストを拡張できます。 構文: <pre>IF(condition;value if true;value if false)</pre> ここで: • <i>condition</i> は、true または false として評価できる値または論理式です。 • <i>value if true</i> は、関連する定量テーブルの列に表示される値です。その場合、<i>condition</i> が true です。 • <i>value if false</i> は、関連する定量テーブルの列に表示される値です。その場合、<i>condition</i> が false です。 注: IF 関数記号は、計算機から選択または入力します。または別のソースからコピーすることができます。IF 関数では、大文字と小文字が区別されません。 注: 文字 && と は、それぞれ および と または に使用できます。演算子 および と または は前後にスペースが必要ですが、演算子 && および には不要です。 数値関数は、IF 関数を使用した数式で使用できます。MEAN や STDEV などの数値関数は、以下で使用できます: <i>condition</i>、<i>value if true</i>、または <i>value if false</i> 式。 IF 条件は、これらの列の信頼度信号をテストできます。 • 質量信頼性 • フラグメント質量誤差の信頼性 • RT 信頼性 • アイソトープ信頼度 • ライブラリ信頼度 • 式信頼度 • 複合ルール 信頼度信号は、緑、黄、赤、またはグレーの値についてテストできます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
IN	要素が値のセットに含まれるかどうかを識別します。要素がセット内にある場合は、<code>true</code> が指定されます。要素がセット内にはない場合は、<code>false</code> が指定されます。 構文: <pre>IN ([Results Table column] number string function; value 1;value 2;value 3)</pre> ここで: • 定量テーブルの列、番号、文字列、または 関数は、定量テーブルの列、数値、テキスト文字列、または関数を検索するために指定されます。 • 値 1; 値 2; 値 3 は、セット内で見つかる最大 100 個の値のリストです。値には、数値、テキスト、または関数を使用できます。 例:IN ([Actual Concentration]; 1;2;3)
INTERCEPT	関数または関係のグラフが座標系の反対側の軸と交差する点を取得します。 構文: • INTERCEPT ([X-value]; [Y-value]) • INTERCEPT ([Y-value]) 注: 値が 1 つだけ指定されている場合は、それが Y 値として使用され、実際の濃度は X 値として使用されます。 INTERCEPT は線形回帰を指します ($y = ax + b$)。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
ISNUMBER	定量テーブルのセルの値が数値または数値以外であることを識別します。値が数値の場合は、true が指定されます。値が数値でない場合は、false が指定されます。 構文: ISNUMBER ([Results Table column]) 例 ¹²: ISNUMBER ([Calculated Concentration]) 注: ISNUMBER が IF 関数などの複雑なステートメントで使われる場合、結果(true または false)は小文字にする必要があります、引用符で囲むことはできません。 例: IF(ISNUMBER ([Area]) = true; 'compound present'; 'compound not present')
LEFT ^{13 14 15}	テキストの先頭から指定した文字数を取得します。 構文: LEFT ([Results Table column]; n) ここで: • n は取得する文字の量です。 例: LEFT ([Sample ID]; 4)
LOG	定量テーブルの列の値または指定された数値の対数を取得します。 構文: LOG (1; 10)
LOG10	定量テーブルの列の値または指定された数値の 10 を底とする対数を取得します。 構文: LOG10 (1)

¹³ この関数は他の関数と併用できます

¹⁴ この関数は、数値、テキスト、またはブール列で使用できます。

¹⁵ この関数はテキスト列での使用をお勧めします。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
MAD	(中央絶対偏差) 定量データの一変量サンプルの変動性の指標を取得します。 MAD の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。
MAX	セット内の最大値を取得します。
MEAN	データサンプル、母集団、または確率分布の上半分を下半分から除算した値を取得します。
MEDIAN	データサンプル、母集団、または確率分布の上半分を下半分から除算した値を取得します。
MIN	セット内の最小値を取得します。
POW	指定された数値を指定された累乗して取得します。 構文: POW(<i>n1</i>;<i>n2</i>) ここで: <i>n1</i> は計算される数値であり、定量テーブルの列、関数、または数値として指定できます。 <i>n2</i> は累乗であり、定量テーブルの列、関数、または数値として指定できます。 例: POW(2, 3) 注: 結果が 1.7E+308 を超える場合は、該当なしが表示されます。
RIGHT ^{13 14 15}	テキストの末尾から指定された文字数を取得します。 構文: RIGHT(<i>[Results Table Column]</i>;<i>n</i>) ここで: <i>n</i> は取得する文字数です。 例: RIGHT(<i>[Barcode]</i>; 3)

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
ROUND ^{2 3}	指定した定量テーブル列またはユーザーが指定した数値を、最も近い整数または指定した小数点以下の桁数に丸めます。 構文: <pre>ROUND([Results Table column];n)</pre> ここで: • n は小数点以下の桁数です。 • 仮に $n > 0$ の場合、数値は指定された小数点以下の桁数に丸められます。 • 仮に $n = 0$ の場合、数値は最も近い整数に丸められます。つまり、小数点以下の桁は使用されません。 • 仮に $n < 0$ の場合、数値は小数点の左側に丸められます。 例: <code>ROUND([Calculated Concentration];0)</code>
SEARCH ^{13 16 17}	標準またはカスタムの定量テーブル列のテキスト内の指定された文字の位置を取得します。 構文: <pre>SEARCH('search string'; [Results Table column]);n)</pre> ここで: • 検索文字列 は、検索するテキストまたは数値です。 • n はテキストセグメントのカウントを開始する文字位置です。 SEARCH はワイルドカード文字の使用をサポートしています。次の表を参照: 表 A-2。

¹⁶ この関数で使用するテキストは大文字と小文字が区別されません。

¹⁷ この **検索文字列** が見つからない場合、結果は**結果のテキスト値を次のように扱う**に対して選択されたオプションによって制御されます。**結果のテキスト値を次のように扱う**が元のテキストに設定されている場合、関数は **該当なし** を取得します。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
SIGN	定量テーブルの列の値または指定された数値の符号を識別する値を取得します。SIGN の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: SIGN (<i>n</i>) ここで: <i>n</i> は累乗であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。
SIN	定量テーブルの列の値または数値として指定された、指定された角度の正弦を取得します。SIN の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: SIN (<i>n</i>) ここで: <i>n</i> は角度であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。
SLOPE	線の方法と急勾配の両方を識別する数値を取得します。勾配とも呼ばれます。 構文: SLOPE ([<i>X-value</i>]; [<i>Y-value</i>]) SLOPE ([<i>Y-value</i>]) 注: 値が 1 つだけ指定されている場合は、それが <i>Y</i> 値として使用され、実際の濃度は <i>X</i> 値として使用されます。 SLOPE は線形回帰を指します ($y = ax + b$)。
SQRT	定量テーブルの列の値または指定された数値の平方根を取得します。 構文: SQRT (<i>n</i>)
STDEV	(標準偏差) 一連のデータ値の変動または分散の量を定量化するために使用される指標を取得します。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
SUBSTITUTE ^{4 13}	標準またはカスタムの定量テーブル列の英数字値を別の英数字値に置き換える列を定量テーブルに作成します。 構文: <pre>SUBSTITUTE ([Results Table column]; 'original alphanumeric value'; 'new alphanumeric value'; n)</pre> ここで: • <i>n</i> (オプション) は、元の 英数字値 の出現箇所であり、新しい英数字の値。仮に <i>n</i> を指定すると、値の <i>n</i> 番目のインスタンスのみが置き換えられます。それ以外の場合、古い値のすべてのインスタンスが新しい値に変更されます。 例: SUBSTITUTE ([Sample Name]; 'STD'; 'STD_00')
SUM	セット内の数値リストの合計を取得します。
TAN	角度の正接を取得します。これは、定量テーブルの列の値または数値として指定できます。TAN の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: <pre>TAN (n)</pre> ここで: • <i>n</i> は角度であり、定量テーブルの列または数値として指定できます。

表 A-1 : 機能 (続き)

機能	説明
TEXT	数値に書式コードを適用して、数値の表示方法を変更します。この機能を使用すると、数字をより読みやすい書式で表示したり、数字、テキスト、記号を一緒に使用したりできます。書式は、数値またはテキストの列に適用できます。書式は、ブール列には適用できません。TEXT の関数は計算機では使用できませんが、入力することはできます。 構文: TEXT ([Results Table Column]; 'format code') ここで: • 定量テーブルの列は、書式設定される列です。 • 書式コードは、列の内容の表示方法を制御します。表 A-3 から表 A-9 を参照してください。
TRIM ¹³	テキストから余分なスペースを削除します。単語を区切るスペースを除き、先頭、末尾、および内部スペースはすべて、標準またはカスタムの定量テーブル列から削除されます。 構文: TRIM ([Results Table column]) 例: TRIM ([Barcode])
TRUNCATE	定量テーブル列の数値の整数部分を取得します。 構文: TRUNCATE ([Results Table column])

表 A-2 : ワイルドカード文字

ワイルドカード文字	説明
?	疑問符 (?) は任意の 1 文字を検索します。 例: SEARCH('?ard'; [Component Comment]; 1) ?ard は card を検索します(テキスト内のテストワイルドカード文字 (?) と (*))。戻り位置は 11 です。 注: 疑問符 (?) を検索するには、文字の前にバックスラッシュ (\) を入力します。 例: SEARCH('\'?'; [Component Comment]; 1) \? は?を検索します(テキスト内のテストワイルドカード文字 (?) と (*))。戻り位置は 28 です。
*	アスタリスク (*) は、任意の文字シーケンスを検索します。 例: SEARCH('*ard'; [Component Comment]; 1) *ard は Test wild card を検索します(テキスト内のテストワイルドカード文字 (?) と (*))。戻り位置は 1 です。 注: アスタリスク (*) を検索するには、文字の前にバックスラッシュ (\) を入力します。 例: SEARCH('\'*'; [Component Comment]; 1) * は、*を検索します(テキスト内のテストワイルドカード文字 (?) と (*))。戻り位置は 36 です。

書式コード

表 A-3 : 年

書式	書式コード	構文	例の結果
00 ~ 99	yy	TEXT ([Results Table Column]; 'yy')	23
1900 ~ 9999	yyyy	TEXT ([Results Table Column]; 'yyyy')	2023

式の参照

表 A-4 : 月

書式	書式コード ¹⁸	構文	例の結果
1 ~ 12	M	TEXT ([Results Table Column]; 'M')	9
01 ~ 12	MM	TEXT ([Results Table Column]; 'MM')	09
1 月から 12 月	MMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMM')	9 月
1 月から 12 月	MMMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMMM')	9 月

表 A-5 : 日

書式	書式コード	構文	例の結果
1 ~ 31	d	TEXT ([Results Table Column]; 'd')	4
01 ~ 31	dd	TEXT ([Results Table Column]; 'dd')	04
日曜から土曜	ddd	TEXT ([Results Table Column]; 'ddd')	月
日曜日から土曜日	dddd	TEXT ([Results Table Column]; 'dddd')	月曜日

表 A-6 : 時間

書式	書式コード	構文	例の結果
0 ~ 12(12 時間表示)	h	TEXT ([Results Table Column]; 'h')	9
01 ~ 12(12 時間表示)	hh	TEXT ([Results Table Column]; 'hh')	09
午前または午後(12 時間表示)	AM/PM	TEXT ([Results Table Column]; 'h AM/PM')	9 PM
0 ~ 24(24 時間表示)	H	TEXT ([Results Table Column]; 'H')	21
00 ~ 24(24 時間表示)	HH	TEXT ([Results Table Column]; 'HH')	09

¹⁸ 書式コードでは、大文字と小文字が区別されます。小文字の *m* は分を書式化するために使用されます。

表 A-7 : 分

書式	書式コード	構文	例の結果
0 ~ 59	m	TEXT ([Results Table Column]; 'm')	7
00 ~ 59	mm	TEXT ([Results Table Column]; mm)	07

表 A-8 : 秒

書式	書式コード	構文	例の結果
0 ~ 59	s	TEXT ([Results Table Column]; 's')	2
00 ~ 59	ss	TEXT ([Results Table Column]; ss)	02

表 A-9 : 数値

書式	書式コード	構文	例の結果
小数点以下の桁数	小数点記号の後に、必要な小数点以下の桁数分の 0 が続きます	TEXT ([Results Table Column]; '#.00')	.24
1 未満の数値の場合、1 の位に	0 を表示	TEXT ([Results Table Column]; '0.000')	0.245
パーセント	%	TEXT ([Results Table Column]; '0%')	24%
千の位のセパレーター	千の位までの各桁に対して # または 0 を使用し、必要なセパレーターを正しい位置に配置します	TEXT ([Results Table Column]; '#,###')	12,200,000
科学的記数法	E+0	TEXT ([Results Table Column]; '0.0E+0')	1.2E+7

お問い合わせ先

お客様のトレーニング

- 北米: NA.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパ: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパおよび北米以外: sciex.com/education

オンライン学習センター

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX サポート

SCIEX およびその代理店には、十分な訓練を受けた保守 / 技術専門のグローバルスタッフがおり、システムに関する質問や技術的な問題にお答えします。詳細については、SCIEX の Web サイト sciex.com をご覧いただくか、以下のリンクからお問い合わせください。

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

サイバーセキュリティ

SCIEX 製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、sciex.com/productsecurity を参照してください。

説明書

このバージョンのドキュメントは、以前のすべてのバージョンのドキュメントに優先します。

このドキュメントを電子的に閲覧するには Adobe Acrobat Reader が必要です。最新バージョンをダウンロードするには、次にアクセスしてください <https://get.adobe.com/reader>。

ソフトウェア製品の説明書については、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

ハードウェア製品の説明書については、システムまたはコンポーネントに付属の説明書を参照してください。

説明書の最新版は SCIEX の web サイト (sciex.com/customer-documents) で入手できます。

注: このドキュメントの無料の印刷版を請求するには、sciex.com/contact-us までお問い合わせください。
