

功能指南

SCIEX OS 软件

计算列



本文件供已购买 **SCIEX** 设备的客户在操作此 **SCIEX** 设备时使用。本文件受版权保护，除非 **SCIEX** 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 **SCIEX** 提供以用于整合到 **SCIEX** 的设备中，并不意味着 **SCIEX** 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

SCIEX 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 **SCIEX** 的唯一且独有的表述、保证和义务。**SCIEX** 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

仅供研究使用。请勿用于诊断过程。

本文提及的商标和/或注册商标，包括相关标志，是 **AB Sciex Pte. Ltd.** 或各自所有者在美国和/或某些其他国家的财产(参见 sciex.com/trademarks)。

AB Sciex™ 的使用经过许可。

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



爱博才思有限公司 **AB Sciex Pte. Ltd.**

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

目录

1 概述.....	4
2 公式.....	5
公式编辑器.....	5
简单算术.....	7
更复杂的函数.....	7
IF 函数.....	8
运算符.....	9
将结果文本值处理为选项.....	10
非默认信息的简单提取.....	11
示例：公式.....	13
GET 函数.....	13
聚合函数.....	22
数值函数.....	24
文本函数.....	27
IF 函数.....	32
3 条件查找.....	36
条件查找编辑器.....	36
示例：条件查找.....	39
A 公式参考.....	49
联系我们.....	67
客户培训.....	67
在线学习中心.....	67
SCIEX 支持.....	67
网络安全.....	67
文档.....	67

计算列是使用公式或条件查找表创建的列。计算列在处理方法中创建。

在处理过程中，软件会应用公式和条件查找表，结果会显示在结果表的自定义列中。

注释：如果使用的是在早期版本 **SCIEX OS** 中创建的计算列，那么请审核结果以确保结果正确无误。

本文档介绍了如何使用计算列功能。

公式

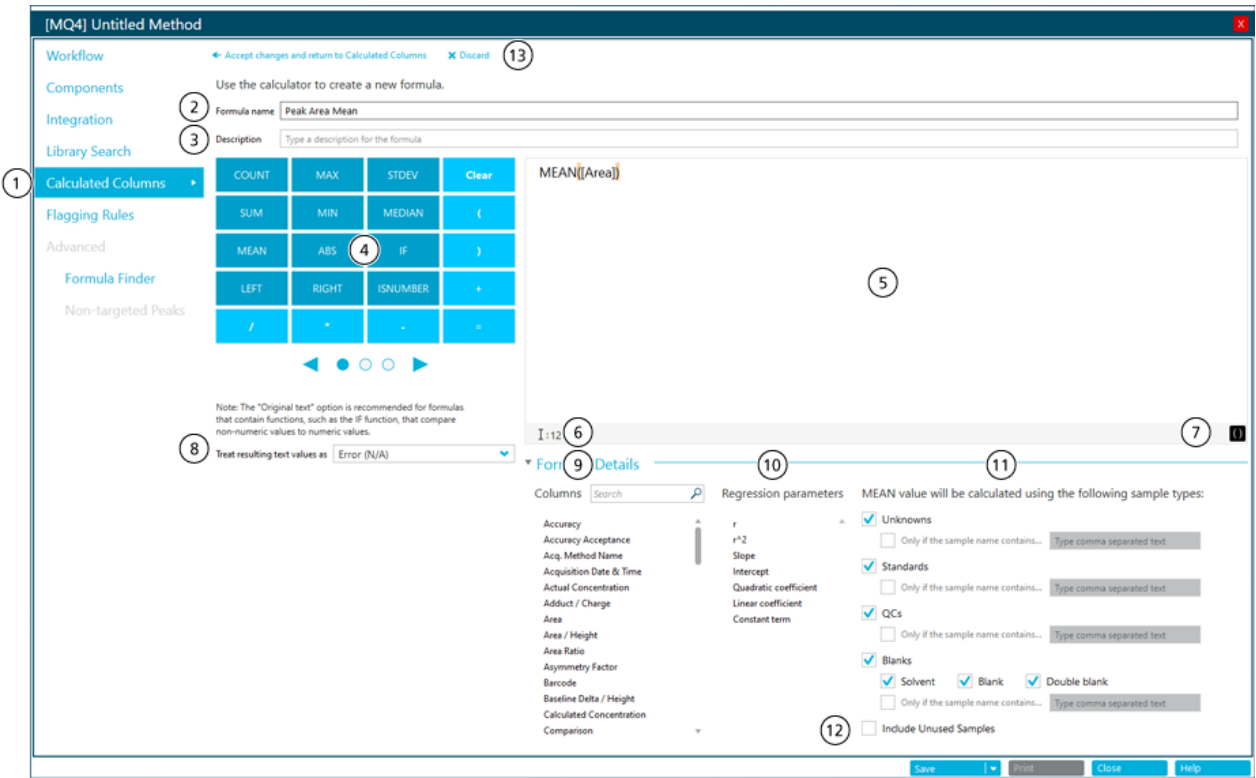
2

注释: 公式可作为 frm1 文件导入和导出, 以供随后使用或共享。

公式编辑器

下图显示了公式编辑器的界面。

图 2-1 公式页面



项目	描述
1	处理方法的工作流中的计算列步骤。单击以打开计算列页面，然后单击 添加 > 公式。

项目	描述
2	公式名称字段。键入公式的名称。
	注释: 公式名称不能包含方括号或圆括号, 也不能与函数名称相同。
	注释: 在标记规则或其他公式中使用公式后, 不能更改公式名称。
	提示! 处理后, 公式将作为一列添加到结果表中。列标题是公式的名称。为充分利用屏幕空间, 我们建议公式名称尽量简短。详细信息可包含在说明字段中。
	提示! 对于有多个公式的计算, 请使用有意义的前缀和数字来标识公式的使用顺序。
3	说明字段。说明显示在计算列页面上。
	提示! 如果可能, 请在说明中包含公式。用户无需打开公式即可了解其内容。
4	包含常用函数和运算符的计算器。请参阅以下章节: 公式参考 和 运算符 。
5	公式字段。键入或选择要在公式中使用的函数、运算符、列和值。
6	验证部分。如果公式字段包含错误, 本部分将显示错误信息。该信息指明发生错误的位置。例如, 如果用户输入以下公式:
	<pre>IFS([Sample Type] == 'Standard'; 'Yes'; 'No')</pre> 则会显示以下错误信息: <pre>The Formula contains an invalid function at position 1: IFS.</pre>
7	将突出显示应用于公式字段中的括号的选项。
8	一组用于控制文本输入操作的选项。将结果文本值处理为字段对于结果表的列而言非常重要, 因为这些列可能同时包含数字和文本输出, 例如 N/A、degenerate、<0、>0、not enough points、less than n 个 points, 以及无穷大符号。更多信息, 请参阅以下章节: 将结果文本值处理为选项
9	可用结果表列。单击列可将其添加到公式字段中。

项目	描述
10	可用的回归参数。单击参数可将其添加到公式字段中。 注释: 回归参数仅显示在校准曲线窗格中。它们没有作为列包含在结果表中。 注释: 仅在线性、过零点线性、二次和过零点二次回归类型的计算列中支持回归参数。它们不支持功率、Wagner 法、Hill 法或平均响应因子回归类型。
11	可用的样本类型。选择该功能将运行的样本类型。 注释: 本节显示的是聚合函数，即对多行进行操作的函数。
12	包含未选择用途复选框的样本的选项。 注释: 本节显示的是聚合函数。默认情况下，只有选中用途复选框的行才会包含在使用聚合函数的计算中。
13	保存或放弃公式的选项。

简单算术

可以创建简单公式以进行基本数学运算。

示例: **R²**

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

在本示例中，乘法运算符 (*) 用于将 **R** 值乘以 **R** 值本身，以计算 **R²** 值。

示例: 每秒采集的点数

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

在本示例中，基线涵盖的点除以从积分色谱峰起点到终点的秒数。此公式使用除法 (/)、乘法 (*) 和减法 (-) 运算符。

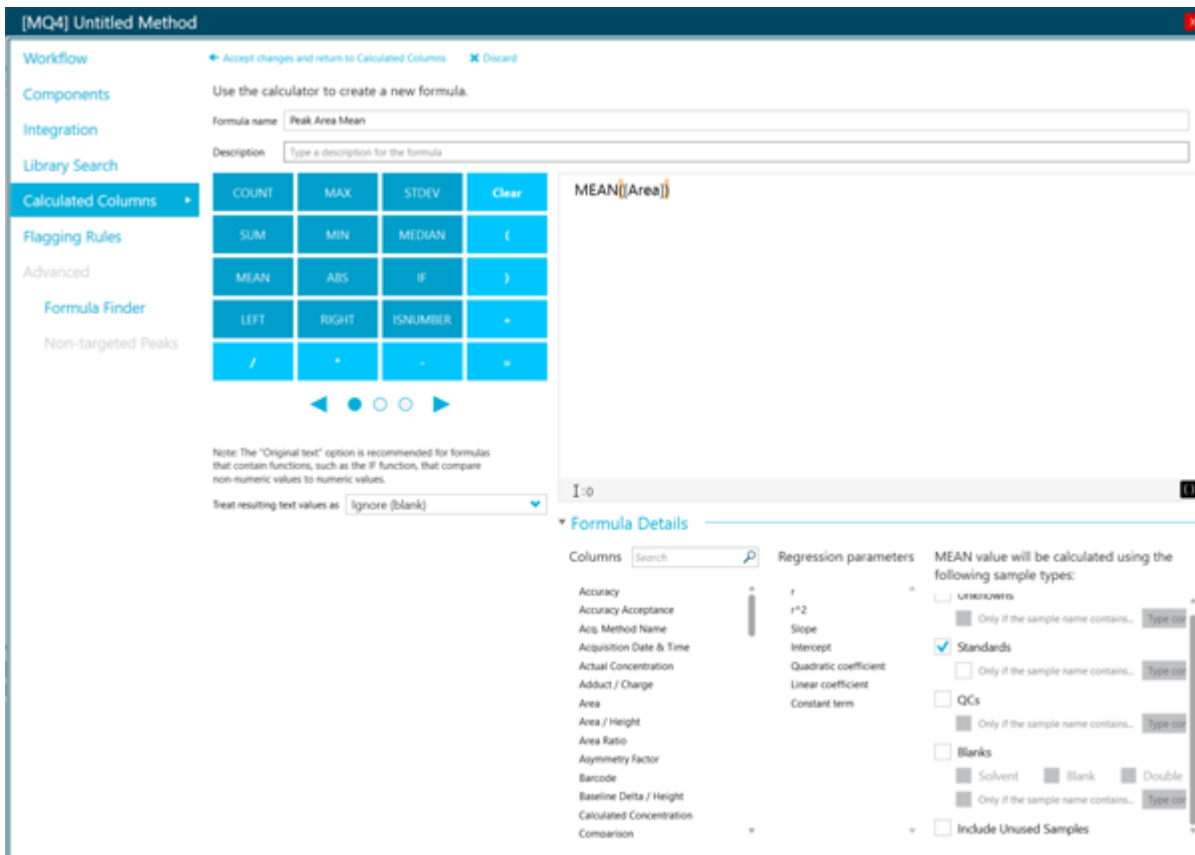
更复杂的函数

还有许多其他函数和控制结构可用。其中一些常用函数包括 **MEAN**、**MAX** 和 **MIN**，显示在计算器中的公式栏下。关于句法详细信息、运算符和函数的完整列表，请按公式编辑器页面上的 **F1** 键。

示例: 用于标准物的 **MEAN([Area])**

使用对所有值进行运算的函数时，用户可以选择要纳入计算的样本。

图 2-2 仅获取标准物样本的峰面积平均值



示例：组合函数

简单算术和更复杂的函数可以组合使用。例如，为了计算每秒采集的平均点数，可以使用以下公式：

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

注释：不建议组合使用聚合函数。为每个聚合函数创建一个单独的列，然后创建一个使用这些列的公式。

IF 函数

IF 函数执行逻辑测试，然后给出 true 或 false 的结果。使用嵌套 **IF** 函数测试多个条件。**IF** 函数可与其他逻辑函数（例如 和 和 或）一起使用，以扩展逻辑测试。

基本 **IF** 语句的句法如下：

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

其中：

- **condition** 是可得出 true 或 false 结果的值或逻辑表达式。

- **value if true** 是当 **condition** 为 **true** 时显示在相关结果表列中的值。
- **value if false** 是当 **condition** 为 **false** 时显示在相关结果表列中的值。

注释: 字符 **&&** 和 **||** 分别可用于 和 和 或。和 和 或 运算符周围必须有空格, 但 **&&** 和 **||** 运算符则不需要。

注释: **IF** 函数符号可以从计算器选择、键入或从其他源复制。**IF** 函数不区分大小写。

注释: 当 **IF** 语句包含多个 **<condition>** 列时, 如果用户连一个 **<condition>** 都不评估, 则 **<value if false>** 输出显示在结果表的自定义列中。

IF 函数还允许将其他数字函数 (例如 平均值 和 标准差) 用于公式中以及 **condition**、**value if true** 或 **value if false** 表达式中。

condition

一些 **condition** 示例包括:

```
[Area]>5000
```

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

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

value if true 代替, 而 **value if false**

重新 **value if true** 代替, 而 **value if false** 可以是数字或文本。

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

注释: 换行符在公式中无效。如果将示例公式粘贴到公式字段中, 请移除换行符。

运算符

表 2-1 运算符 (包括在计算器中)

运算符	描述
/	运算符前的值除以运算符后的值。
*	运算符前的值乘以运算符后的值。
-	运算符后的值减去运算符前的值。
=	显示函数的输出。
+	运算符前的值加上运算符后的值。

表 2-1 运算符（包括在计算器中） (续)

运算符	描述
()	指定运算顺序。将要首先完成的计算放在括号中。

表 2-2 比较和逻辑运算符（可以手动键入）

运算符	描述
<	如果运算符前的值小于运算符后的值，则结果为 true。否则，结果为 false。
<=	如果运算符前的值小于或等于运算符后的值，则结果为 true。否则，结果为 false。
>	如果运算符前的值大于运算符后的值，则结果为 true。否则，结果为 false。
>=	如果运算符前的值大于或等于运算符后的值，则结果为 true。否则，结果为 false。
!=	如果运算符前的值不等于运算符后的值，则结果为 true。否则，结果为 false。
&&	如果运算符前后的表达式都为真，则结果为 true。如果表达式中有一个或两个为假，则结果为 false。布尔 和 运算符的字符表示。 && 、和 或两者都可以在公式中使用。
	如果运算符之前或之后的表达式为真，则结果为 true。如果两个表达式均为 false，则结果为 false。布尔 或 运算符的字符表示。 、或 或两者都可以在公式中使用。
true	对于包含复选框的列，确定要选择其复选框的列。 示例 ¹ : IF ([Sample Type] = 'Standard'&&[Used] = true&&[Reportable] = true; 'Qualified STD reported'; '')
false	对于包含复选框的列，确定其复选框要清除的列。

将结果文本值处理为选项

将结果文本值处理为选项可控制如何在包含文本或数字和文本组合的自定义结果表列中解读文本。例如，样本类型列仅包含文本，母离子质量列仅包含数值，计算所得浓度列可同时包含数值和文本。

对于每个公式，用户都可以将结果文本值处理为选项设置为适用于该公式中所用函数的值。下列值可用：

- 零

¹ 换行符在公式中无效。如果将公式粘贴到公式字段中，请移除换行符。

- 忽略（空白）
- 误差（不适用）
- 原始文本

注释：有关这些选项的更多信息，请参阅文档：《帮助系统》。

如果使用下列函数进行计算，则推荐的选项是零、忽略（空白）或误差（不适用）：计数、**MAX**、标准差、**SUM**、**MIN**、**MEDIAN**、**GET**、**GETGROUP**、**SLOPE**、**INTERCEPT**、**MAD**、**GETSTAT**、**GETSAMPLECLOSEST**、**GETSAMPLECLOSESTHIGH**、**GETSAMPLECLOSESTLOW** 或 **GETSAMPLEEQUAL**。当公式包含可能会有数值的列时，也推荐在 **IF** 语句中使用这些选项。

为文本值推荐的串联选项是原始文本。

示例

此示例串联两个包含文本值的列。在此例中，推荐使用原始文本选项。

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

该公式增加了包含样本名称及其类型的摘要列。例如，如果样本名称为 **Calibrator 1**，类型为 **Standard**，则计算列包含 Calibrator 1 Standard。对于此公式，将结果文本值处理为设置为原始文本。

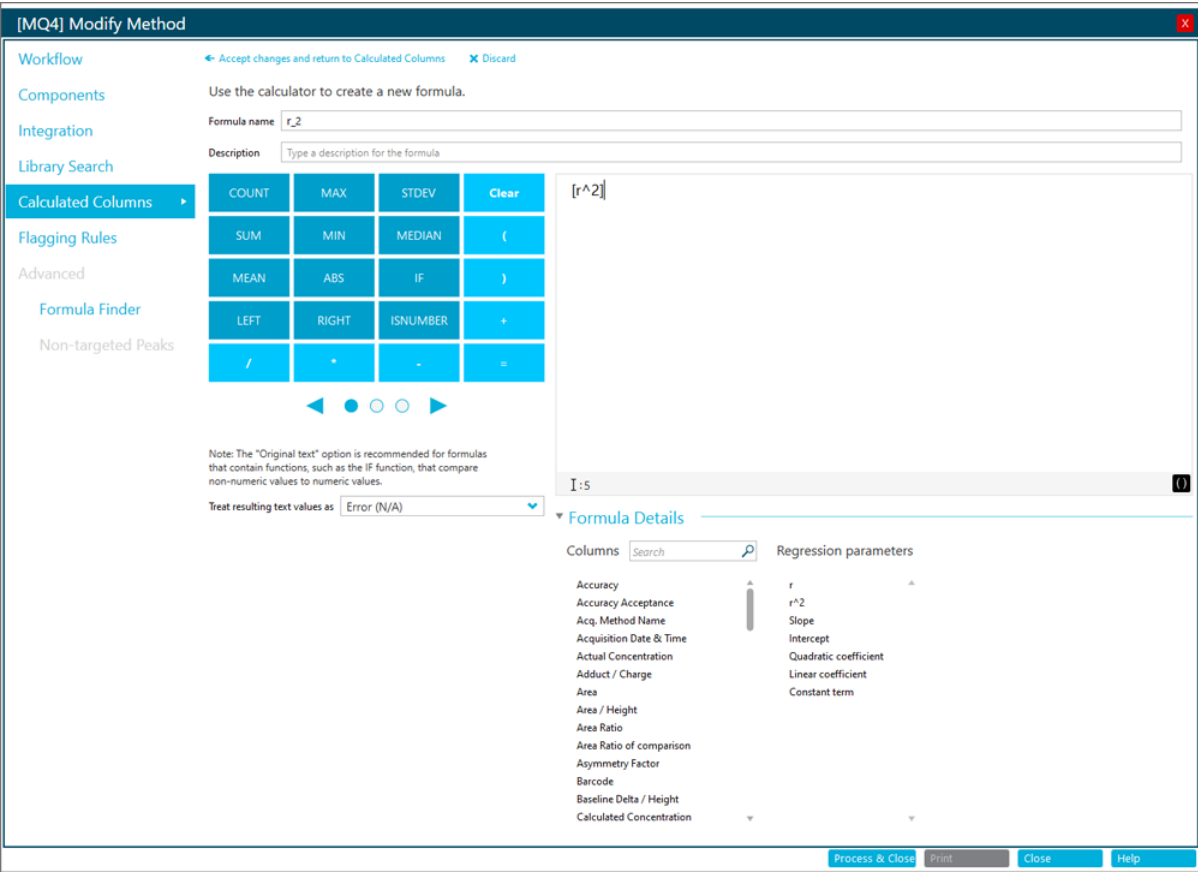
，，增加一个空格。

非默认信息的简单提取

计算列功能允许用户显示在结果表中默认不可用的信息。

例如，要在结果表中显示 R^2 列，在回归参数列表中单击 R^2 。

图 2-3 使用计算列创建自定义列



示例：公式

GET 函数

找出与未知样本面积最接近的标准物的离子率 (GETSAMPLECLOSEST)

图 2-4 公式：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

注释：下表概述了上图中的设置。

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSEST ([Ion Ratio]; [Area])	与其他样本面积最接近的标准物的离子比率。请参阅下图中的列 1： 图 2-5 。	标准品	误差（不适用）	否

GETSAMPLECLOSESTHIGH、GETSAMPLECLOSESTLOW 和 GETSAMPLEEQUAL

表 2-4 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
High Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio]; [Area])	面积大于或等于未知样本面积的最接近标准物的离子率。请参阅下图中的列 2: 图 2-5。	标准品	误差 (不适用)	否
Low Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTLOW ([Ion Ratio]; [Area])	面积小于或等于未知样本面积的最接近标准物的离子率。请参阅下图中的列 3: 图 2-5。	标准品	误差 (不适用)	否
Equal Ref MRM Ratio	GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio]; [Area])	GETSAMPLEEQUAL 的结果仅适用于标准物。请参阅下图中的列 4: 图 2-5。	标准品	误差 (不适用)	否

比较两个连续样本的面积：用于分析回收和残留的 **GETVALUE**

表 2-5 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Previous SampleIndex	[Sample Index]-1	结果表中上一个样本的索引。	不适用	误差 (不适用)	不适用
Previous SampleArea	GETVALUE ([Area]; [PreviousSampleIndex]; [Sample Index])	在此样本之前采集的样本中各成分的面积。	标准品	误差 (不适用)	否

公式

图 2-6 结果表: 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

将两个离子对的值移入一行：**GETGROUP**

表 2-6 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
GET Ametryn Group CalcConc	GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 1') + GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 2')	莠灭净 1 和莠灭净 2 的总计算所得浓度。	未知物	误差（不适用）	否
GETGROUP Qual CalcConc	GETGROUP ([Calculated Concentration]; 2)	该组中第二个离子对的计算所得浓度。	未知物	误差（不适用）	否

公式

图 2-7 结果表: GET Ametryn Group CalcConc 和 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

为标记和报告提供统计值: GETSTAT

表 2-7 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
CV%STD	GETSTAT ('Percent CV'; 'Calculated Concentration')	标准物和 QC 样本统计表中计算所得浓度的百分比 CV 值。	不适用	误差 (不适用)	不适用

表 2-7 设置 (续)

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Av_RT_Prefix	GETSTAT ('MEAN';'Retention Time';'Sample Name Prefix')	按样本名称前缀分组的样本的保留时间平均值。	标准品	误差（不适用）	否

公式

图 2-8 结果表: 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	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

图 2-9 结果表: 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

聚合函数

聚合函数是对多行数据进行操作的函数。例如，**MIN** 函数查找结果表中某列的最小值。**MEAN** 函数计算某列的平均值。

表 2-8 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
STD COUNT Area	COUNT ([Area])	标准物样本中找到的面积值数量	标准品	忽略	否
STD MAX Area	MAX ([Area])	标准物样本中找到的最大面积值	标准品	忽略	否
STD MEAN Area	MEAN ([Area])	标准物样本的面积平均值	标准品	忽略	否
STD MEDIAN Area	MEDIAN ([Area])	标准物样本的面积中位值	标准品	忽略	否
STD MIN Area	MIN ([Area])	标准物样本的最小面积值	标准品	忽略	否
STD STDEV Area	标准差 ([Area])	标准物样本的面积值标准偏差	标准品	忽略	否
STD SUM Area	SUM ([Area])	标准物样本所有面积值的总和	标准品	忽略	否

图 2-10 结果表：聚合函数

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

数值函数

表 2-9 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Rounded Calc.Conc	ROUND([Calculated Concentration];3)	计算所得浓度四舍五入到小数点后3位。	不适用	误差（不适用）	不适用
Calc.Conc Ceiling	CEILING([Calculated Concentration])	大于（或等于）计算所得浓度的最小整数。	不适用	误差（不适用）	不适用
Calc.Conc Floor	FLOOR([Calculated Concentration])	小于（或等于）计算所得浓度的最小整数。	不适用	误差（不适用）	不适用

图 2-11 结果表：数值函数

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

注释: 在此例中，**ROUND** 函数使用三位小数，如公式中所示：**ROUND** ([计算所得浓度]; 3)。**CEILING** 函数获取大于或等于计算所得浓度的最小整数。该值在结果表显示设置对话框中配置为一位小数。**FLOOR** 函数获取小于或等于计算所得浓度的最大整数。该值在结果表显示设置对话框中配置为零位小数。

公式

数字格式

表 2-10 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Calc.浓度 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];'#,###'))	根据结果限值格式化的计算所得浓 度。	不适用	误差（不适用）	不适用

文本函数

使用计算浓度确定需要检查的峰：**ISNUMBER**

表 2-11 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Calc.浓度 Review	ISNUMBER ([Calculated Concentration])	<i>true</i> 如果计算所得浓度包含数字， 或者 <i>false</i> 如果没有包含。	不适用	误差（不适用）	不适用
Review Peak	ISNUMBER ([Calc. Conc. Review]= true;[Area];' Review Needed')	如果计算出的浓度是一个数字，那么面积就是一个数字。如果计算的浓度为文本，则显示“需要检查”。	不适用	误差（不适用）	不适用

公式

图 2-12 结果表: Calc.浓度 Review 和 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

从样品 **ID** 和条形码列提取信息：**LEFT**、**TRIM** 和 **RIGHT**

表 2-12 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Assay	LEFT ([Sample ID];4)	样本 ID 的前四个字符（字母或数字）。	不适用	误差（不适用）	不适用
Barcode Trim	TRIM ([Barcode])	去掉所有空格后的条形码列内容。	不适用	误差（不适用）	不适用
Req #	RIGHT ([Barcode Trim];8)	Barcode Trim 的最后 8 个字符。	不适用	误差（不适用）	不适用

公式

图 2-13 结果表：包含 LEFT、TRIM 和 RIGHT 函数的计算列

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		

项目	描述
1	样本 ID 列的前四个字符。
2	除字符串之间的单个空格外，删除条形码列中所有前导空格、尾部空格和内部空格。
3	Barcode Trim 列的最后八个字符。

注释: 建议不要将 **LEFT** 和 **RIGHT** 函数用于数值列。计算时不考虑结果表显示设置对话框中应用的数值的数字格式精度。这些函数对完整基础值进行运算。

文本格式

表 2-13 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
Date Format 1	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'yyyy-MMMM-dd')	2022 年 5 月 4 日	不适用	误差（不适用）	不适用
Date Format 2	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'MM/dd/yyyy')	05/04/2022	不适用	误差（不适用）	不适用
Date Format 3	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'dddd MMM dd, yyyy')	2022 年 5 月 4 日星期三	不适用	误差（不适用）	不适用

公式

IF 函数

使用内标物面积的平均值测试内标物性能

软件会计算适用样本内标物 (IS) 面积的平均值，并将平均值与 1e6 进行比较。如果 **MEAN ([IS 面积])** 大于 1e6，即 *condition* 为真，则内标物面积的平均值显示在相关结果表列中。如果 **MEAN ([IS 面积])** 小于 1e6，即 *condition* 为假，则显示审核 IS 性能。

表 2-14 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
IS Performance	IF (MEAN ([IS Area]) >= 1e6; MEAN ([IS Area]); 'Review IS performance')	如果为真，则为内标物面积平均值，如果为假，则为文本“审核 IS 性能”。	不适用	误差（不适用）	不适用

确保未知样本中分析物的保留时间与校准标准品的保留时间相同，允许偏差 **±0.1** 分钟

表 2-15 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
RT_Check	IF ([Sample Type]='Unknown'; IF (ABS (MEAN ([Retention Time] - [Retention Time])) <= 0.1; 'RT Pass'; 'RT Fail'); 'N/A')	如果样本的保留时间与标准品的保留时间相差超过 0.1，则为 RT Fail。如果小于此值，则为 RT Pass。如果样本不是未知样本，则为 N/A。	标准品	误差（不适用）	否
STD Mean RT	MEAN ([Retention Time])	所有标准物样本的平均保留时间。	标准品	忽略	否

表 2-15 设置 (续)

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
RT delta	ABS ([STD Mean RT]-[Retention Time])	平均保留时间与样本保留时间之差的绝对值。	全部	误差（不适用）	否
Check RT delta	IF ([RT delta]>0.1;'RT Fail';'RT Pass')	如果样本的保留时间与未知物的保留时间相差超过 0.1 ，则为 RT Fail。如果小于此值，则为 RT Pass。	不适用	误差（不适用）	否
Check RT Unknowns	IF ([Sample Type]='Unknown';[Check RT delta];'N/A')	Check RT delta 输出中的未知样本。	不适用	误差（不适用）	否

公式

图 2-14 结果表: 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

使用离子率置信度红绿灯识别需要修改的峰

IF 函数可用于对含红绿灯的列进行测试。红绿灯的值有： 红色、 黄色、 绿色和 灰色。

表 2-16 设置

名称	公式	输出	样本类型	将结果文本值处理为	包括未使用的样本
MRM Ratio Fails	IF ([Ion Ratio Confidence]='Red' [Ion Ratio Confidence]='Yellow' [Ion Ratio Confidence]='Grey'; 'Needs Revision'; 'Pass')	如果离子率置信度是红色、黄色或灰色，则为 Needs Revision。如果不是，则为 Pass。	不适用	误差（不适用）	不适用

图 2-15 结果表: **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

条件查找

3

条件查找列包含由其他列的值控制的值，如条件查找表条目所指定。

条件查找表中的条目包含以下信息：

- 标准或自定义结果表列
- 条件，例如 **Equals**
- 查找值
- 要显示在结果表的条件查找列中的输出值

如果查找列使用多个条件，则这些条件与布尔 **AND**（非 **OR**）运算符一起使用。如果条件组合为假，即没有结果，则使用默认输出字段中的值。

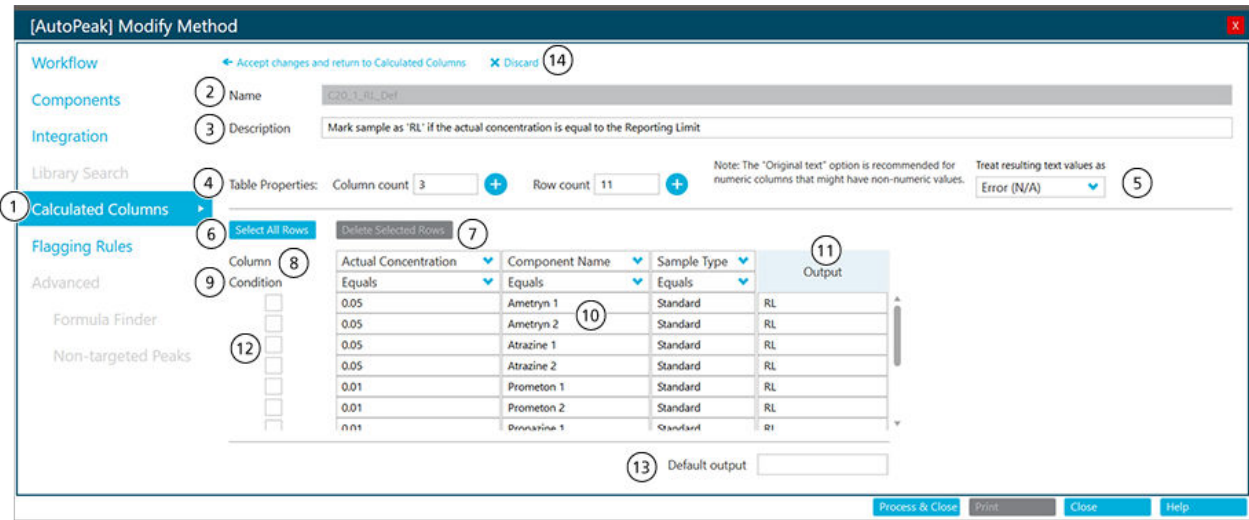
在处理过程中，为每个条件查找创建一个结果表列。如果列中至少有一个结果是数字，则该列为数字列，可以为该列选择数字格式。如果查找列中的结果都不是数字，则该列为文本列。

标记可用于使用条件查找创建的结果表列。这些列也可以在公式中使用。

条件查找编辑器

下图显示了条件查找编辑器的界面。

图 3-1 条件查找编辑器



项目	描述
1	处理方法的工作流中的计算列步骤。单击以打开计算列页面，然后单击添加 > 条件查找。

项目	描述
2	名称字段。键入公式的名称。 提示! 处理后, 条件查找将作为一系列添加到结果表中。列标题是条件查找的名称。为充分利用屏幕空间, 我们建议名称尽量简短。详细信息可包含在说明字段中。
3	说明字段。说明显示在计算列页面上。
4	表格的行数和列数。要更改列数或行数, 请在列数或行数字段中键入数字。或者, 单击适用  来添加列或行。
5	一组用于控制文本输入操作的选项。结果表中, 将结果文本值处理为字段对于可能包含数字和文本输出 (例如 N/A 以及简并和无穷符号) 的列非常重要。更多信息, 请参阅以下章节: 将结果文本值处理为选项
6	单击以选择所有行。
7	单击以删除选定行。
8	在条件查找中使用的列。可以使用自定义文本列、计算列和条件查找列。 注释: 此字段具有右键菜单, 可用于添加、删除、复制和粘贴列。
9	条件查找表中使用的条件。可用的条件包括: • 等于 • 不等于 • 开始于 • 包含 • 小于 • 小于或等于 • 大于 • 大于或等于
10	条件语句中使用的值。该值必须适用于结果表列的类型。该值可以是数字、布尔值 (true 或 false) 或文本。 注释: 此字段具有右键菜单, 可用于添加、删除、复制和粘贴列和行。
11	满足所有条件时, 条件查找列中显示的值或文本。 注释: 此字段具有右键菜单, 可用于添加、删除、复制和粘贴列和行。

条件查找

项目	描述
12	选择该复选框以选择要删除的行。
13	当不满足任何条件时，条件查找列中显示的值或文本。 注释: 此字段具有右键菜单，可用于剪切、复制和粘贴此字段中的内容。
14	保存或放弃条件查找的选项。

示例：条件查找

示例：由分析物（化合物名称）和样本基质类型（样本 ID）控制的可报告下限和上限

图 3-2 条件查找表：输出值设置为与分析物和样本基质类型相关的可报告下限

Workflow

Components

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

Accept changes and return to Calculated Columns

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

图 3-3 条件查找表：输出值设置为与分析物和样本基质类型相关的可报告上限

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

Condition

☐

Component Name

Equals

☐

Sample ID

Equals

☐

Output

☐

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

图 3-4 结果表: LRL 和 URL 条件查找列

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

条件查找

示例：用于由样本基质类型（样本 ID）控制的未知样本（样本类型）计算所得浓度的稀释系数

图 3-5 条件查找表：输出值设置为与样本基质类型相关的稀释系数

← 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

图 3-6 公式：应用于计算所得浓度的条件查找列

Accept changes and return to Calculated Columns

Discard

Formula name

Corrected Conc.

Description

Recalculates Calculated Concentration of unknown samples based on dilution factor

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

[Calculated Concentration]*[x Dil. Factor]

Formula Details

Columns

x

Regression parameters

x Dil. Factor

XIC Width (Da)

XIC Width (ppm)

r

r^2

Slope

Intercept

Quadratic coefficient

Linear coefficient

Constant term

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

图 3-7 结果表：调整后的计算所得浓度

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

结果表显示设置对话框中应用的数值数字格式精度不包含在数学公式中。公式对完整基础值进行运算。

这同样适用于数值的比较。对结果表中的数值应用条件查找时，条件查找表中的数值必须与完整基础值相同，有效数字可多达 15 位。如果对结果表中显示的数值进行比较，则可能无法实现匹配。

图 3-8 数字格式精度=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: 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	Component...	Expected RT	Output
Condition	Equals	Equals	
☐	Methadone 105	2.38	On time
☐	Tapentadol 107	1.86	On time
☐			

Default output:

Process & Close
Print
Close
Help

图 3-9 结果表：数字格式精度=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	

图 3-10 公式：数字格式精度=3

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

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

Default output

Process & Close

Print

Close

Help

图 3-11 结果表：数字格式精度=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 函数

函数	描述
ABS	获取指定数字的绝对值。 句法： ABS (<i>n</i>) 示例： ABS (-1)
ACOS	获取余弦为结果表列的值或指定数值的角度。 ACOS 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： ACOS (<i>n</i>) 其中： • <i>n</i> 是余弦，它可指定为结果表列或数值。
ASIN	获取正弦为结果表列的值或指定数值的角度。 ASIN 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： ASIN (<i>n</i>) 其中： • <i>n</i> 是正弦，它可指定为结果表列或数值。
ATAN	获取反正切为结果表列的值或指定数值的角度。 ATAN 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： ATAN (<i>n</i>) 其中： • <i>n</i> 是反正切，它可指定为结果表列或数值。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
CEILING ^{2 3}	获取大于或等于指定结果表列中显示的值或指定数值的最小整数。 句法： CEILING (<i>[Results Table column]</i>) 示例: CEILING (<i>[Calculated Concentration]</i>)
COS	获取角度的余弦值，它可指定为结果表列的值或一个数值。 COS 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： COS (<i>n</i>) 其中： <i>n</i> 是角度，它可指定为结果表列或数值。
计数	获取集合中的项数。
EXP	获取升高到指定幂的 e ，它可以是结果表列的值或指定数值。 句法： EXP (<i>n</i>) 其中： <i>n</i> 是幂，它可指定为结果表列或数值。 注释: 如果幂超过 709，则显示 不适用。

² 该函数可用作函数内的函数，并使用用户指定的数值。
³ 用户选择的要应用这些函数的列必须采用数字格式。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
FIND ⁴	获取文本中的指定字符在标准或自定义结果表列中的位置。 句法: FIND(<i>'search string'</i>;[<i>Results Table column</i>];<i>n</i>) 其中: <i>search string</i> 是要查找的文本或数值。 <i>n</i> 是从文本开始计算之处算起的字符位置。 注释: FIND 函数可用于 FIND 或其他函数中。 - 当 FIND 函数用于 FIND 函数中时, 首先完成内部 FIND。随后的位置用作外部 FIND 的起始索引。 - 如果内部 FIND 得出无效值, 即如果未找到 <i>search string</i>, 则该公式被视为无效, 为 将结果文本值处理为 选择的选项控制输出值。 - 如果 FIND 函数应用于无效条目, 且 将结果文本值处理为 设置为 原始文本, 则相关结果表列中显示 不适用。 FIND 函数不支持通配符。
FLOOR ^{2 3}	获取小于或等于指定结果表列中显示的数值或指定数值的最大整数。 句法: FLOOR([<i>Results Table column</i>]) 示例: FLOOR([<i>Calculated Concentration</i>])
GET	获取指定成分的值。 句法: GET([<i>Results-Table-column</i>]; '<i>Component-Name</i>')

⁴ 此函数中使用的文本区分大小写。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
GETGROUP	获取组中的指定离子对的值。 句法： GETGROUP ([Results-Table-column]; n) 其中： • n 是组中离子对的编号。 注释: 如果在成分部分中未识别任何组，则 GETGROUP 函数会将所有成分视为同一组的成员。
GETSAMPLE ^{5 6}	从所选类型样本的标准或自定义结果表列中获取值。 句法： GETSAMPLE ([Results Table column]; 'Sample Name') 示例: GETSAMPLE ([Area]; 'Low QC')
GETSAMPLECLOSEST ^{7 8 9 10 11}	从所选类型样本的标准或自定义结果表列（其值与用户指定的值最接近）中获取值。 句法： GETSAMPLECLOSEST ([Results Table column 1]; [Results Table column 2]) 其中： • 结果表第 1 列 是输出值。 • 结果表第 2 列 是输入值。 示例 ¹² : GETSAMPLECLOSEST ([Ion Ratio]; [Area])

⁵ 如果多个样本具有相同的 样本名称，则软件会提供来自所处理的第一个匹配样本的数据。
⁶ 如果在结果表中未找到指定的 样本名称，则结果由为将结果文本值处理为选择的选项控制。
⁷ 输入值必须是数字列。
⁸ 该函数使用所存储数据中的数值精度进行比较，而不使用在结果表中配置的精度。
⁹ 如果处理的多个样本具有相同的输入值，则软件会提供来自所处理的第一个匹配样本的数据。
¹⁰ 如果指定的输入值不在结果表中，则结果由为将结果文本值处理为选择的选项控制。
¹¹ 样本类型选择对输入值可用。
¹² 换行符在公式中无效。如果将公式粘贴到公式字段中，请移除换行符。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
GETSAMPLECLOSESTLOW ^{7 8 9 10 11}	从所选类型的最接近样本的标准或自定义结果表列（其值小于或等于用户指定的值）中获取值。 句法： GETSAMPLECLOSESTLOW(<i>[Results Table column 1]</i>; <i>[Results Table column 2]</i>) 其中： - 结果表第 1 列 是输出值。 - 结果表第 2 列 是输入值。 示例¹²：GETSAMPLECLOSESTLOW(<i>[Ion Ratio]</i>; <i>[Area]</i>)
GETSAMPLECLOSESTHIGH ^{7 8 9 10 11}	从所选类型的最接近样本的标准或自定义结果表列（其值大于或等于用户指定的值）中获取值。 句法： GETSAMPLECLOSESTHIGH(<i>[Results Table column 1]</i>; <i>[Results Table column 2]</i>) 其中： - 结果表第 1 列 是输出值。 - 结果表第 2 列 是输入值。 示例¹²：GETSAMPLECLOSESTHIGH(<i>[Ion Ratio]</i>; <i>[Area]</i>)
GETSAMPLEEQUAL ^{7 8 9 10 11}	从所选类型样本的标准或自定义结果表列（其值等于用户指定的值）中获取值。 句法： GETSAMPLEEQUAL(<i>[Results Table column 1]</i>; <i>[Results Table column 2]</i>) 其中： - 结果表第 1 列 是输出值。 - 结果表第 2 列 是输入值。 示例：GETSAMPLEEQUAL (<i>[Ion Ratio]</i>; <i>[Area]</i>)

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
GETSTAT	将统计窗格中显示的平均值、标准差、百分比 CV 或平行样之间的平均准确度列添加到结果表。 句法: GETSTAT ('Statistics-pane-column'; 'Metric'; 'Grouping') 其中: • Statistics-pane-column 必须与该列的名称完全相同, 如统计窗格中所示。 • 度量 是计算统计数据时所用的属性。可以为计算所得浓度、面积、高度和校准 Y 值计算统计数据。 • (可选) 分组 指定了某一分析物的样本如何分组以计算统计量。可用选项包括: 实际浓度、样本名称、样本 ID、样本名称前缀、样本评注、条形码、扫描的条形码 和 进样位置。如果未指定分组选项, 则使用实际浓度。 注释: 如果未选择分组选项, 则 GETSTAT 提取标准物和 QC 样本类型的统计量 (平均值、标准差、%CV 和平行样之间的平均准确度), 按实际浓度分组。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
GETVALUE ⁸	比较两个结果表列中的值，或一个结果表列中的值和用户指定的值。当比较的值相同时，函数会获取第三个结果表列的值。GETVALUE 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： GETVALUE ([Results Table Column 1]); n1; [Results Table Column 2] 其中： • 结果表第 1 列 是当 <i>n1</i> 与 结果表第 2 列相同时函数将从其获取值的列。 • <i>n1</i> 是用于比较的列或用户指定的值。<i>n1</i> 可以是结果表列、计算列、自定义文本列、数字或文本。列必须用方括号括起来：[]。文本必须用单引号括起来。数字不得用引号括起来。 • 结果表第 2 列 是用于比较的结果表列、计算列或自定义文本列。 注释： • 如果多个样本具有相同的输入值，则该函数会从第一个被处理的样本中获取数据。 • 如果在结果表中找不到输入值，那么结果将由为将结果文本值处理为选择的选项控制。 • 样本类型选择对输入值可用。
IEEEREMAINDER	获取结果表列或用户指定的数值除以结果表列或用户指定的数值得出的余数。IEEEREMAINDER 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： IEEEREMAINDER (n1; n2) 其中： • <i>n1</i> 是被除数，它可指定为结果表列或数值。 • <i>n2</i> 是除数，它可指定为结果表列或数值。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
IF	执行逻辑测试，然后给出 true 或 false 的结果。使用嵌套 IF 函数测试多个条件。IF 函数可与其他逻辑函数（例如，和 和 或）组合，以扩展逻辑测试。 句法： IF(<i>condition</i>; <i>value if true</i>; <i>value if false</i>) 其中： • <i>condition</i> 是可得出 true 或 false 结果的值或逻辑表达式。 • <i>value if true</i> 是当 <i>condition</i> 为 true 时显示在相关结果表列中的值。 • <i>value if false</i> 是当 <i>condition</i> 为 false 时显示在相关结果表列中的值。 注释: IF 函数符号可以从计算器选择、键入或从其他源复制。IF 函数不区分大小写。 注释: 字符 && 和 分别可用于 和 和 或。和 和 或 运算符周围必须有空格，但 && 和 运算符则不需要。 数字函数可在公式中与 IF 函数一起使用。数值函数，如 MEAN 和 标准差，可用在 <i>condition</i>、<i>value if true</i> 或 <i>value if false</i> 表达式中。 IF 条件可以测试这些列中的置信度红绿灯： • 质量置信度 • 碎片质量误差置信度 • RT 置信度 • 同位素置信度 • 谱库置信度 • 公式置信度 • 组合规则 可以测试值绿色、黄色、红色或灰色的置信度红绿灯。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
IN	确定元素是否处在值的集合中。如果元素处在集合中，则提供 true。如果元素不在集合中，则提供 false。 句法： IN ([Results Table column] number string function; value 1;value 2;value 3) 其中： - 结果表列、<i>number</i>、<i>string</i> 或 <i>function</i> 指定后用于搜索结果表列、数值、文本字符串或函数。 <i>value 1;value 2;value 3</i> 是在该集合中找到的值的列表，最多 100 个值。这些值可以是数值、文本或函数。 示例： IN([Actual Concentration]; 1;2;3)
INTERCEPT	获取函数或关系图与坐标系的相反轴相交的点。 句法： INTERCEPT ([X-value];[Y-value]) INTERCEPT ([Y-value]) 注释: 如果仅指定一个值，则将其用作 Y 值，并将实际浓度用作 X 值。 INTERCEPT 是指线性回归 ($y = ax + b$)。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
ISNUMBER	确定结果表的单元格中的值为数值还是非数值。如果该值为数值，则提供 true。如果该值为非数值，则提供 false。 句法: ISNUMBER(<i>[Results Table column]</i>) 示例 12: ISNUMBER(<i>[Calculated Concentration]</i>) 注释: 当 ISNUMBER 用在复杂语句中时，例如用于 IF 函数，结果 (true 或 false) 必须为小写字母，且不得放在引号中。 示例: IF(ISNUMBER(<i>[Area]</i>) = true; 'compound present'; 'compound not present')
LEFT ^{13 14 15}	从文本开头获取指定数量的字符。 句法: LEFT(<i>[Results Table column];n</i>) 其中: • <i>n</i> 是要获取的字符数量。 示例: LEFT(<i>[Sample ID];4</i>)
LOG	获取结果表列的值或指定数值的对数。 句法: LOG(1;<i>10</i>)
LOG10	获取结果表列的值或指定数值的以 10 为底的对数。 句法: LOG10(1)

¹³ 该函数可与其他函数结合使用。
¹⁴ 该函数可用于数值、文本或布尔列中。
¹⁵ 建议在文本列中使用该函数。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
MAD	(中位数绝对偏差) 获取定量数据单变量样本的变异性的度量。 MAD 函数在计算器上不可用, 但可以键入。
MAX	获取集合中的最大值。
MEAN	获取数字列表的总和除以列表中的数字个数。
MEDIAN	获取数据样本、总体或概率分布的下半部分除以上半部分得出的值。
MIN	获取集合中的最小值。
POW	获取升高到指定幂的指定数值。 句法: POW(<i>n1</i>; <i>n2</i>) 其中: • <i>n1</i> 是要升高的数字, 它可以指定为结果表列、函数或数值。 • <i>n2</i> 是幂, 它可以指定为结果表列、函数或数值。 示例: POW(2, 3) 注释: 如果结果超过 1.7E+308, 则显示不适用。
RIGHT ^{13 14 15}	从文本末尾获取指定数量的字符。 句法: RIGHT([<i>Results Table Column</i>]; <i>n</i>) 其中: • <i>n</i> 是要获取的字符数量。 示例: RIGHT([Barcode]; 3)

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
ROUND ^{2 3}	将指定结果表列中的数值或用户指定的数值，舍入到最接近的整数或指定的小数位数。 句法： ROUND ([Results Table column];n) 其中： • <i>n</i> 是小数位数。 • 如果指定了 <i>n</i> > 0，则数字四舍五入到指定的小数位数。 • 如果指定了 <i>n</i> = 0，则数字四舍五入为最接近的整数，即不使用小数位。 • 如果指定了 <i>n</i> < 0，则数字四舍五入到小数点左侧。 示例： ROUND ([Calculated Concentration];0)
SEARCH ^{13 16 17}	获取文本中的指定字符在标准或自定义结果表列中的位置。 句法： SEARCH ('search string'; [Results Table column]);n) 其中： • <i>search string</i> 是要查找的文本或数值。 • <i>n</i> 是从文本开始计算之处算起的字符位置。 SEARCH 支持使用通配符。请参阅表格： 表 A-2。
SIGN	获取一个值，用于识别结果表列的值或指定数值的符号。 SIGN 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： SIGN (n) 其中： • <i>n</i> 是幂，它可指定为结果表列或数值。

¹⁶ 此函数中使用的文本不区分大小写。

¹⁷ 如果未找到 *search string*，则结果由为将结果文本值处理为选择的选项控制。如果将结果文本值处理为设置为原始文本，则该函数获取不适用。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
SIN	获取指定角度的正弦，指定为结果表列的值或一个数值。 SIN 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： SIN (<i>n</i>) 其中： <i>n</i> 是角度，它可指定为结果表列或数值。
SLOPE	获取识别线的方向和陡峭度的数值。也称为梯度。 句法： SLOPE ([<i>X-value</i>]; [<i>Y-value</i>]) SLOPE ([<i>Y-value</i>]) 注释：如果仅指定一个值，则将其用作 <i>Y</i> 值，并将实际浓度用作 <i>X</i> 值。 SLOPE 是指线性回归 ($y = ax + b$)。
SQRT	获取结果表列的值或指定数值的平方根。 句法： SQRT (<i>4</i>)
标准差	(标准差) 获取一种用于量化一组数据的偏差或离散程度的度量。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
SUBSTITUTE ^{4 13}	在结果表中创建一个列，用于将字母数字值替换为来自标准或自定义结果表列的另一个字母数字值。 句法： SUBSTITUTE([Results Table column]; 'original alphanumeric value'; 'new alphanumeric value'; n) 其中： • <i>n</i>（可选）是 <i>original alphanumeric value</i> 的出现次数，该值将被替换为 <i>new alphanumeric value</i>。如果指定了 <i>n</i>，则仅替换该值的第 <i>n</i> 个实例。否则，旧值的每个实例都将更改为新值。 示例： SUBSTITUTE([Sample Name]; 'STD'; 'STD_00')
SUM	获取集合中数字列表的总和。
TAN	获取角度的正切，它可以指定为结果表列的值或一个数值。TAN 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： TAN(<i>n</i>) 其中： • <i>n</i> 是角度，它可指定为结果表列或数值。
TEXT	将格式代码应用于数字，以更改数字的显示方式。该函数可用于以更易读的格式显示数字，或同时使用数字、文本和符号。格式化可应用于数字或文本列，但不能应用于布尔列。TEXT 函数在计算器上不可用，但可以键入。 句法： TEXT([Results Table Column]; 'format code') 其中： • <i>Results Table Column</i> 是要格式化的列。 • <i>format code</i> 控制列内容的显示方式。参考表格：表 A-3 至 表 A-9。

表 A-1 函数 (续)

函数	描述
TRIM ¹³	删除文本中多余的空格。除了分隔单词的空格之外，所有前导、尾随和内部空格都将从标准或自定义结果表列中删除。 句法： TRIM(<i>[Results Table column]</i>) 示例： TRIM(<i>[Barcode]</i>)
TRUNCATE	获取结果表列中的数字的整数部分。 句法： TRUNCATE (<i>[Results Table column]</i>)

表 A-2 通配符

通配符	描述
?	问号 (?) 可用于查找任何单字符。 示例： SEARCH('?ard';[Component Comment];1) ?ard 可在以下文本中查找 card: <i>Test wild card characters (?)</i>和 <i>(*)</i>。返回位置为 11。 注释： 要搜索问号 (?), 在字符前键入反斜杠 (\)。 示例： SEARCH('\'?';[Component Comment];1) \? 可在以下文本中查找 ? : <i>Test wild card characters (?)</i>和 <i>(*)</i>。返回位置为 28。

表 A-2 通配符 (续)

通配符	描述
*	星号 (*) 可查找任何字符序列。 示例: SEARCH('*ard';[Component Comment];1) *ard 可在以下文本中查找 Test wild card: <i>Test wild card characters</i> (?)和 (*). 返回位置为 1。 注释: 要搜索星号 (*), 在字符前键入反斜杠 (\)。 示例: SEARCH('\'*';[Component Comment];1) * 可在以下文本中查找 *: <i>Test wild card characters</i> (?)和 (*). 返回位置为 36。

格式代码

表 A-3 年份

格式	格式代码	句法	结果示例
00 至 99	yy	TEXT ([Results Table Column];'yy')	23
1900 至 9999	yyyy	TEXT ([Results Table Column];'yyyy')	2023

表 A-4 月份

格式	格式代码 ¹⁸	句法	结果示例
1 - 12	M	TEXT ([Results Table Column];'M')	9
01 至 12	MM	TEXT ([Results Table Column];'MM')	09
一月至十二月	MMM	TEXT ([Results Table Column];'MMM')	九月
一月至十二月	MMMM	TEXT ([Results Table Column];'MMMM')	九月

¹⁸ 格式代码区分大小写。小写 *m* 用于格式化分钟。

表 A-5 天

格式	格式代码	句法	结果示例
1 至 31	d	TEXT ([Results Table Column];'d')	4
01 至 31	dd	TEXT ([Results Table Column];'dd')	04
星期日至星期六	ddd	TEXT ([Results Table Column];'ddd')	星期一
星期日至星期六	dddd	TEXT ([Results Table Column];'dddd')	星期一

表 A-6 小时

格式	格式代码	句法	结果示例
0 至 12 (12 小时制)	h	TEXT ([Results Table Column];'h')	9
01 至 12 (12 小时制)	hh	TEXT ([Results Table Column];'hh')	09
上午或下午 (12 小时制)	AM/PM	TEXT ([Results Table Column];'h AM/PM')	9 PM
0 至 24 (24 小时制)	H	TEXT ([Results Table Column];'H')	21
00 至 24 (24 小时制)	HH	TEXT ([Results Table Column];'HH')	09

表 A-7 分钟

格式	格式代码	句法	结果示例
0 至 59	m	TEXT ([Results Table Column];'m')	7
00 至 59	mm	TEXT ([Results Table Column];mm)	07

表 A-8 秒

格式	格式代码	句法	结果示例
0 至 59	s	TEXT ([Results Table Column];'s')	2

表 A-8 秒 (续)

格式	格式代码	句法	结果示例
00 至 59	ss	TEXT ([Results Table Column];ss)	02

表 A-9 数字

格式	格式代码	句法	结果示例
小数位	小数分隔符后， 每个所需的小数 位后加一个 0。	TEXT ([Results Table Column]; '#.00')	.24
小于 1 的数字， 在个位位置上为 0	0 在个位的位置	TEXT ([Results Table Column]; '0.000')	0.245
百分比	%	TEXT ([Results Table Column]; '0%')	24%
千位分隔符	# 或 0 表示千位 以内的每个数 字，并在正确位 置上输入所需的 分隔符	TEXT ([Results Table Column]; '#,###')	12200000
科学记数法	E+0	TEXT ([Results Table Column]; '0.0E+0')	1.2E+7

联系我们

客户培训

- 北美地区: NA.CustomerTraining@sciex.com
- 欧洲: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 在欧盟与北美之外请访问 sciex.com/education

在线学习中心

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX 支持

SCIEX 及其代表机构在全球拥有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。如需了解更多信息, 请访问 SCIEX 网站 (sciex.com) 或通过下面的链接之一与我们联系。

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

网络安全

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南, 请访问 sciex.com/productsecurity。

文档

本版本的文档取代本文档的所有先前版本。

要查看本文档的电子版本, 需要 Adobe Acrobat Reader。要下载最新版本, 请转到 <https://get.adobe.com/reader>。

要查找软件产品文档, 请参阅软件随附的版本发行说明或软件安装指南。

要查找硬件产品文档, 请参阅系统或组件随附的文档。

最新版本的文档可从 SCIEX 网站上获得, 网址: sciex.com/customer-documents。

注释: 如需免费获取本文档的印刷版本, 请联系 sciex.com/contact-us。
