

报告模板编辑器

概念指南



Agilent Technologies

注意

© 安捷伦科技有限公司，2009–2012，2013

根据美国和国际版权法，未经安捷伦公司书面许可，本书内容不得以任何形式复制（包括电子存储修改或翻译）。

手册部件号

G4635-97014

版本

01/2013

Germany 印刷

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

如果体外诊断系统已在相关权威机构注册并符合相关法规，本产品可用作其组件之一。否则只可用于常规实验室。

软件版本

本指南适用于 Agilent OpenLAB CDS
A.01.05 版。

声明

本书内容如有改变，恕不另行通知。安捷伦科技公司对本材料，及由此引出的任何商务和特种用途不承担责任。安捷伦科技公司对本手册中可能有的错误或与装置、性能及材料使用有关内容而带来的意外伤害和问题不负任何责任。如果安捷伦与用户对本书中的警告术语有不同的书面协议，这些术语与本书中的警告术语冲突，则以协议中的警告术语为准。

技术许可

本书对硬件和/或软件的介绍已获得特许，未经许可，不得使用或复制。

权力限制说明

如果软件用于某一美国政府基本合同或次级合同，软件的使用将作为下列情况之一被许可：按照法案 DFAR 252.227-7014（1995年6月）确定的“商业计算机软件”；或者按照法案 FAR 2.101 (a) 确定的“商业条款”；或者按照法案 FAR 52.227-19（1987年6月）确定的“限制计算机软件”；或者任何相当机构法规或合同条款。软件的使用，复制或解密受安捷伦科技标准商业许可条款的管理，美国政府的非 DOD 部门和机构将获得不比法案 FAR 52.227-19 (c) (1-2)（1987年6月）大的权利。美国政府的用户将获得不比法案 FAR 52.227-14 (c) (1-2)（1987年6月）或 DFAR 252.227-7015 (b) (2)（1995年11月）确定的限制权利大的权利，这一原则适用于任何技术数据。

安全警告

小心

小心提示表示危险。提醒您在操作过程中注意，如果执行不当，将影响产品或丢失重要数据。不要忽视**小心**提示。

警告

警告提示表示危险。提醒您在操作过程中注意，如果执行不当，将导致人身伤害或死亡。不要忽视**警告**提示。

内容提要...

本指南包含针对模板开发人员的信息。主要描述了报告模板编辑器 (RTE) 的概念和高级功能。

有关基本任务和用户界面的信息，请参见 RTE 在线帮助。

1 概述

本章简要描述了报告模板编辑器的各种可用功能。

2 文本字段和数据字段

本章描述了 RTE 中文本字段和数据字段的特性和用法。

3 表

本章描述 RTE 中表的特性和用法。

4 矩阵

本章描述 RTE 中矩阵的特性和用法。

5 复合组

本章描述 RTE 中复合组的特性和用法。

6 图像

本章描述 RTE 中图像的特性和用法。

7 色谱

本章描述 RTE 中色谱的特性和用法。

8 校正曲线

本章描述 RTE 中校正曲线的特性和用法。

9 光谱

本章描述 RTE 中光谱的特性和用法。

10 图表

本章介绍 RTE 中图表的特性和用法。

11 方法信息

本章介绍 RTE 中方法信息表达式的特性和用法。

13 表达式

本章介绍 RTE 中表达式的特性和用法。

14 计算变量

本章描述 RTE 中计算变量的特性和用法。

19 附录

本章节包含表达式编辑器中可用的所有操作符和函数的列表。

目录

1 概述	9
概述	10
报告类型	12
使用模板	13
2 文本字段和数据字段	19
文本字段和数据字段	20
使用字段	23
3 表	25
关于表	26
使用表	27
关于表组	39
使用表组	41
4 矩阵	43
关于矩阵	44
关于矩阵组	45
使用矩阵	47
5 复合组	51
关于复合组	52
使用复合组	53
6 图像	55
关于图像	56
7 色谱	57
关于色谱	58
使用色谱图	61

8	校正曲线	67	
	关于校正曲线	68	
	使用校正曲线	70	
9	光谱	73	
	关于光谱	74	
	使用光谱	76	
10	图表	79	
	关于图表	80	
	使用图表	88	
11	方法信息	93	
	关于方法信息	94	
	筛选特定部分	95	
12	仪器信息	97	
	早期维护预警 (EMF) 计数器	98	98
	仪器模块	98	
13	表达式	99	
	关于表达式	100	
	使用表达式	110	
14	计算变量	117	
	关于变量	118	
	使用变量	123	
15	报告模板审计跟踪	131	
	关于报告模板审计跟踪	132	132
16	报告参数	133	
	关于报告参数	134	
	使用报告参数	135	

17 文档结构图	139
关于文档结构图	140
使用文档结构图	142
18 锁定 / 解锁的报告项目	145
关于锁定 / 解锁的报告项目	146
锁定或解锁报告项目	147
19 附录	149
枚举	150
诊断数据中的关键字	162



1 概述

概述	10
报告类型	12
使用模板	13
添加和配置报告项目	13
移动报告项目或调整其大小	13
对齐报告项目	14
放置“报告项目”浏览器	17
显示或隐藏“报告项目”浏览器	17
更改页面宽度和页边距	18

本章简要描述了报告模板编辑器的各种可用功能。



概述

不同应用程序提供的数据

您可以使用不同应用程序（例如 OpenLAB ECM 智能报告、OpenLAB CDS ChemStation 或 OpenLAB CDS EZChrom 版本）中的报告模板。使用报告模板，用户可以使用特定设计（如带序列列表和统计信息的序列概述，或者交叉序列汇总）创建报告。报告将包含各自程序的当前会话中所选择的数据。

报告模板的文件格式

所有报告模板基于报告定义语言（RDL），这是 Microsoft® 提供的标准化 XML 格式。

创建和编辑报告模板

要创建报告模板，您可以使用报告模板编辑器（RTE）或 Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio（BI Studio）：

- RTE 提供了易于使用的界面来帮助您通过几个步骤创建报告模板。该界面支持所有类型的报告项目和大多数各自的配置选项。RTE 用户界面适合处理 OpenLAB CDS 数据。

使用 RTE，您无法编辑使用 BI Studio 创建的模板。

- BI Studio 提供了全套的功能（例如，您可为复杂计算或高级表达式创建自定义代码）。BI Studio 是一个通用工具，并不专门用于处理分析数据。

在 BI Studio 中，您可以编辑任何报告模板，无论这些报告模板是使用 RTE 还是使用 BI Studio 创建的。

不过，使用 BI Studio 需要有模板开发的高级知识。有关更多信息，请参阅《高级报告模板设计手册》。本手册还详细介绍了随 OpenLAB ECM 智能报告工具一起提供的 Agilent 报告模板。

注意

这些模板是专门为在 BI Studio 中使用而设计的，并包含大多数在 RTE 中不可用的高级功能。

段

RTE 提供各种预配置的报告项目（所谓的段），您可以在自己的模板中使用它们。这些项目被组织在反映其内容的文件夹中。段所在的文件夹和子文件夹由代码段本身决定，无法更改。

报告模板文档

报告模板文档工具是一个独立的应用程序，可用来查看受 RTE 支持的报告模板的说明。它也可以以 PDF 格式保存该说明。报告模板的说明包括报告项目版面及其参数的详细信息，如计算变量、报告参数、使用的表达式、筛选条件、排序条件、审计跟踪等。

要启动报告模板文档工具，可运行 `TemplateDocumentation.exe` 文件。默认情况下，该文件位于 ChemStation 版本的 `c:\chem32\core` 位置，或 EZChrom 版本的 `c:\Program Files\Agilent Technologies\EZChrom` 位置。应用程序启动后，您可以在出现的对话框中选择一个报告模板。

报告类型

每个模板都有特定的报告类型。根据此报告类型，模板连接到特定的数据库视图。因此，根据报告类型的不同，在报告模板中提供不同的数据字段。另外，RTE 还根据报告类型的不同以不同方式显示报告项目。包含以下几种报告类型：

- **“单次进样”**：您可以使用与样品采集（序列 / 样品 / 进样 / 仪器）、结果（信号 / 峰 / 化合物 / 校正曲线）和项目管理（文件 / 项目）有关的任何信息。
使用此报告类型，RTE 将自动创建一个包含当前数据范围内所有进样的列表，然后为每个进样单独显示模板中的报告项目。因此，您无需担心复合组在进样 ID 上出现重复。另一方面，您不能在一个表或矩阵中比较不同进样的结果。
- **“单个序列汇总”**：您可以使用与单个进样报告中相同的信息。
使用此报告类型，RTE 将自动创建一个包含当前数据范围内所有序列的列表，然后为每个序列单独显示模板中的报告项目。因此，您无需担心复合组在序列 ID 上出现重复。另一方面，您不能在一个表或矩阵中比较不同序列的结果。
- **“交叉序列汇总”**：您可以使用与单个进样报告中相同的信息。
使用此报告类型，数据不会自动分组。因此，您必须更加注意报告项目的分组，但这样您就可以创建比较来自不同序列的数据的报告项目。

使用模板

添加和配置报告项目

- 1 在“报告项目”浏览器中，打开所需项目类型的树状图，再往下进入报告项目级别。
- 2 将报告项目拖动到模板中。
- 3 按住手柄调整项目大小，或按住灰色边框移动项目。
- 4 要配置报告项目，请在上下文菜单中右键单击“属性”。您也可以双击该报告项目。
如果双击文本字段，则可以直接输入值。
如果双击数据字段，则可以直接输入该字段的标签。
如果双击表头，则可以直接输入表头文本。
如果双击其他报告项目，则会打开对应的“属性”对话框。
- 5 根据您的需要调整属性。
- 6 选择“文件” > “保存”或“文件” > “另存为”，即可保存报告模板。

移动报告项目或调整其大小

要移动报告项目，请执行以下操作：

- 用鼠标按住报告项目边框，将它拖动到新位置。
 - 或者 -
- 选择报告项目，再使用方向键。

要调整报告项目的大小，请执行以下操作：

- 用鼠标按住报告项目边框的手柄，再拖动到所需的新大小。
 - 或者 -
- 选择报告项目，再按 Shift+ 方向键。

对齐报告项目

注意

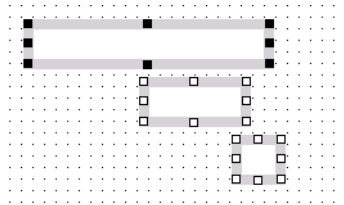
- 锁定的复合组中的报告项目无法使用对齐和间距选项。
- 锁定的报告项目无法使用定义大小选项。
- 从多个区域（即正文、页眉或页脚）选择的多个报告项目无法使用间距选项。

若要使多个报告项目相互对齐

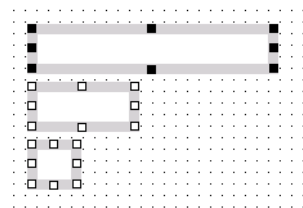
若要对齐多个报告项目，复合组不能包含任何所选项目，或所有项目必须均在同一个复合组中。

- 1 单击想要用来对齐其他报告项目的报告项目。
- 2 按住 Ctrl 键，同时单击想要对齐的项目。

选择的第一个报告项目用黑色正方形高亮显示。选择的其他项目用白色的正方形高亮显示。

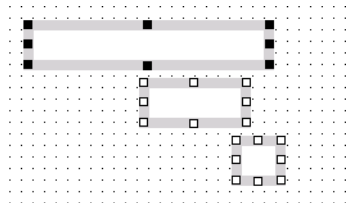


- 3 右键单击其中一个所选项目，然后从上下文菜单中选择合适的“对齐”命令。所有项目均将与选择的第一个项目对齐。下图显示了对齐左边距后的报告项目。



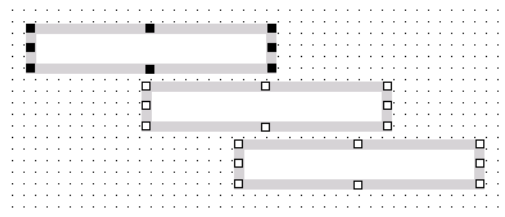
将多个报告项目设置为相同大小

- 1 单击想要使用其宽度或高度的文本字段或数据字段。
- 2 按住 Ctrl 键，同时单击想要调整的文本字段或数据字段。



- 3 右键单击其中一个所选项目，然后从上下文菜单中选择合适的“设置为相同大小”命令。

宽度或高度或两者会被调整至选择的第一个项目的大小。下图显示了为所有项目设置了相同的宽度后的报告项目。

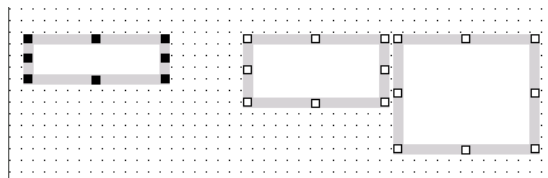


设置相等的水平间距

若要调整多个报告项目之间的间距，复合组不能包含任何所选项目，或所有项目必须均在同一个复合组中。

- 1 选择想要调整间距的文本字段或数据字段。选择项目的顺序并不重要。
- 2 水平对齐项目（“顶端”、“中间”或“底端”）。

下图显示了顶端对齐的示例。

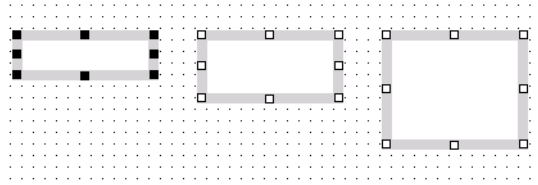


- 3 右键单击其中一个所选项目，然后从上下文菜单中选择“水平间距” > “间距相等”。

选择的所有项目之间均会使用相同的水平间距。

1 概述

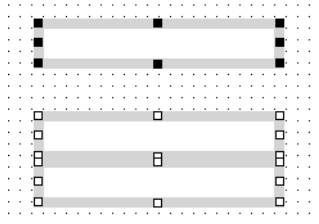
使用模板



设置相等的垂直间距

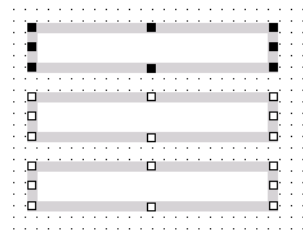
- 1 选择想要调整间距的文本字段或数据字段。选择项目的顺序并不重要。
- 2 垂直对齐项目（“左对齐”、“右对齐”或“居中”）。

下图显示了使用了相同宽度并且进行了左对齐的示例。



- 3 右键单击其中一个所选项目，然后从上下文菜单中选择“垂直间距” > “间距相等”。

选择的所有项目之间均会使用相同的垂直间距。



放置“报告项目”浏览器

您可以将“报告项目”浏览器放在“编辑窗格”的左侧或右侧。


- 1 将“报告项目”浏览器的标题栏拖动到“编辑窗格”的另一侧。

“报告项目”浏览器会对齐到右侧或左侧，具体取决于松开标题栏时鼠标所处的位置。

显示或隐藏“报告项目”浏览器

您可以始终显示“报告项目”浏览器，或将它折叠再根据需要动态显示。默认情况下，“报告项目”会始终处于可见状态。

要折叠“报告项目”浏览器，请执行以下操作：


- 1 单击 。


“报告项目”浏览器随即折叠。它显示为“编辑窗格”边上的一个垂直标签。

- 2 单击垂直标签或只需将鼠标移动到垂直标签上方，即可在需要时显示“报告项目”浏览器。

“报告项目”浏览器随即显示。您将鼠标移开时，它会重新折叠。

要始终显示“报告项目”浏览器，请执行以下操作：

- 1 动态显示的“报告项目”浏览器的标题栏包含一个水平图钉 。单击该图钉。

图钉即会变为垂直状态 。现在，“报告项目”浏览器即会始终可见。

更改页面宽度和页边距

- 1 在“报告属性”菜单中，更改“页面布局”下的值。

可以通过“页面高度”和“页面宽度”对页面大小进行设置。可以通过“上边距”、“下边距”、“左边距”和“右边距”对页面边距进行设置。

- 2 保存设置。

显示在“编辑窗格”中的区域已将在报告属性中配置的页边距考虑在内。生成报告时，RTE 会自动添加这些页边距。

如果新页面宽度过小，造成无法打印所有报告项目，则超出页面大小的区域将以浅灰色背景显示。如果存在灰色区域，则将打印附加页。

- 3 根据需要，从灰色区域删除或移动报告项目，或调整其大小。

- 4 移动灰色区域：将鼠标移至灰色区域的右侧边框之上。当光标变为双向箭头后，将光标移至左侧。



2 文本字段和数据字段

文本字段和数据字段	20
使用字段	23
调整标签部分的宽度	23
直接输入文本	23
添加换行符	23

本章描述了 RTE 中文本字段和数据字段的特性和用法。



文本字段和数据字段

可用字段

“报告项目”浏览器中数据字段的种类取决于以下因素：

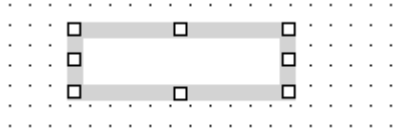
- 选定的报告类型
- 色谱数据系统

字段类型

报告模板编辑器提供以下类型的字段：

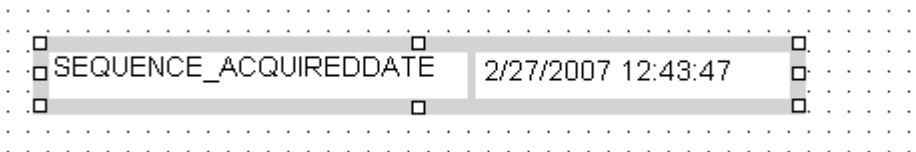
- **文本字段**基本上是一些简单文本框，它可以包含静态文本或动态表达式。例如，文本字段用于显示报告模板中的静态标题。

在“报告项目”浏览器中，可在“特殊对象”类别中找到“文本字段”。



- **数据字段**分为两个部分：标签和值。标签包含静态文本，值包含动态表达式。数据字段通常用于显示特定数据，例如序列名称或样品名称。不过，您可以按自己的需要修改标签和值。

在“报告项目”浏览器中，可在“字段”类别中找到所有可用数据字段。

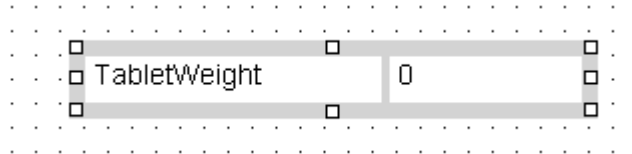


- **自定义字段**是特殊类型的数据字段。自定义字段在色谱数据系统中（例如在 ChemStation 的方法定义中）配置。通过自定义字段，您可以创建属于特定上下文（例如样品或化合物）的自定义信息（标签和值）。RTE 允许使用自定义字段执行计算。

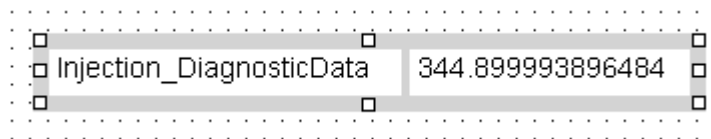
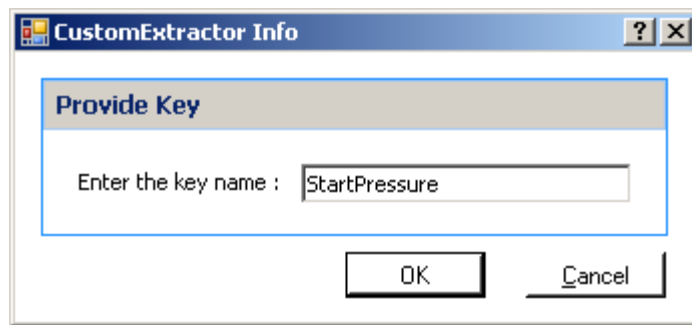
与常规数据字段相反，为自定义字段显示的标签不是数据字段的名称（如“Sample_CustomField01”），而是自定义标签信息（如“TabletWeight”）。

这通过在值的表达式中使用 Trim、Choose 和 Split 函数的组合来实现。RTE 自动创建此表达式。

您可以在色谱数据系统中配置标签和值。



- **复杂自定义字段**是不包含单个值而是包含整个 XML 结构的数据字段。此 XML 结构包含各种键 / 值对。如果将此类字段拖到模板中，将出现一个对话框，要求您输入要访问的信息的键。因此，RTE 创建一个数据字段，其中标签是该复杂自定义字段的名称，值是存储在给定键下的特定值。此值借助 CFE 函数来评估。RTE 自动创建此表达式。



根据色谱数据系统，可能有以下可用的复杂自定义字段：

- “进样” > “诊断数据”：有关进样的信息，如起始压力、停止压力或空气温度。键取决于所使用的色谱数据系统（请参见第 162 页的“诊断数据中的关键字”）。
- “序列” > “自定义字段”：数据字段“序列自定义字段 01”到 10（或更高，如果有超过 10 个自定义字段的话）中包含的所有标签和值。
- “样品” > “自定义字段”：数据字段“样品自定义字段 01”到 10（或更高，如果有超过 10 个自定义字段的话）中包含的所有标签和值。

2 文本字段和数据字段

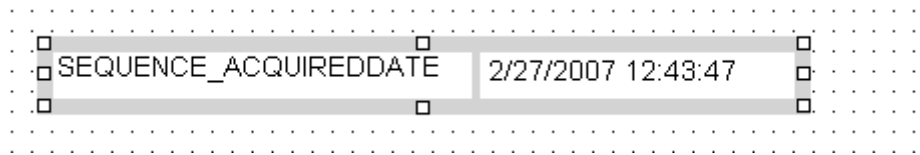
文本字段和数据字段

- “进样” > “自定义字段”：数据字段“进样自定义字段 01”到 10（或更高，如果有超过 10 个自定义字段的话）中包含的所有标签和值。
- “化合物” > “自定义字段”：数据字段“化合物自定义字段 01”到 10（或更高，如果有超过 10 个自定义字段的话）中包含的所有标签和值。

使用字段

调整标签部分的宽度

数据字段分为两个部分：标签和值。



要调整标签部分的宽度，请将鼠标放在标签和值的分界线上，再将分界线拖动到所需的宽度。

直接输入文本

在文本字段中，您可以通过双击“编辑窗格”中的文本字段来直接输入文本。输入的文本与项目属性中配置的“值”相对应。您可以输入静态文本或动态表达式（以等号开头）。

在数据字段中，您只能直接编辑标签部分；双击它即可。

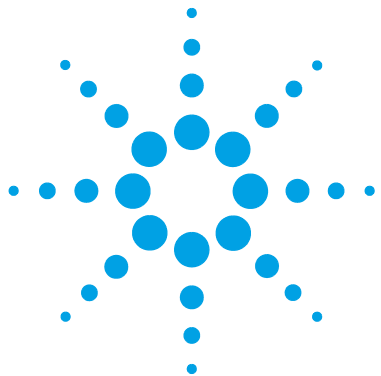
添加换行符

您可使用多种选项来输入换行符。

- 直接在“编辑窗格”中编辑文本，然后按 `Ctrl+Enter`。
- 在“表达式编辑器”中编辑文本字段的“值”，然后按 `Ctrl+Enter`。
- 在“表达式编辑器”中编辑文本字段的“值”，然后输入 Visual Basic 常量 `vbNewLine`。例如，表达式形式如下所示：

```
= "Retention" + vbNewLine + "Time"
```

2 文本字段和数据字段 使用字段



3 表

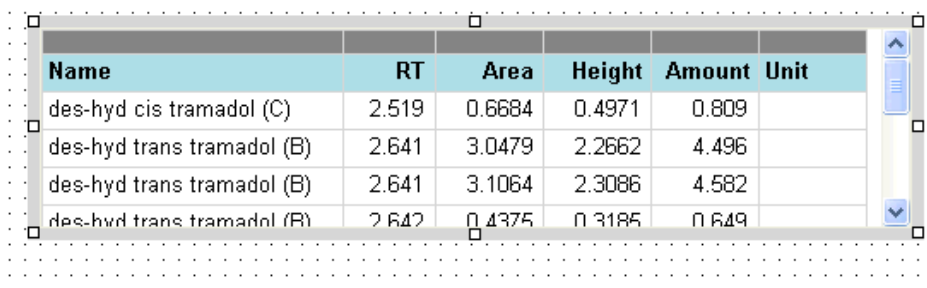
关于表	26
使用表	27
添加和删除列	27
删除列	28
更改表列的顺序	28
调整列宽度	29
调整表中的颜色和字体	29
用条件格式高亮显示离群值	30
调整表边框	31
更改列标题	31
在表标题中插入换行符	32
创建第二个表行	32
更改表中文本对齐方式	34
调整表中的数字格式	34
配置表的页脚	35
对表排序	35
筛选表	36
筛选峰面积或面积百分比	37
重复表	38
关于表组	39
使用表组	41
配置表组	41

本章描述 RTE 中表的特性和用法。



关于表

使用表，可以按 2 维格式显示结果。例如，表格可用于汇总样品 / 序列的结果。列和标题的数量是静态的，行数对应于数据集中的记录数。



Name	RT	Area	Height	Amount	Unit
des-hyd cis tramadol (C)	2.519	0.6684	0.4971	0.809	
des-hyd trans tramadol (B)	2.641	3.0479	2.2662	4.496	
des-hyd trans tramadol (B)	2.641	3.1064	2.3086	4.582	
des-hyd trans tramadol (B)	2.642	0.4375	0.3185	0.649	

基本上，每个表包含一个特定数据集，该数据集由基模板的类型决定（请见第 12 页的“报告类型”）。因此，如果没有任何进一步的配置，表将为数据集中的每条记录显示一行，其中记录是未排序、未分组并且未筛选的。为对数据进行组织和结构化，可以通过以下选项来配置表：

- “**重复表打开**”：多次显示表，其中每个表仅包含根据特定关键信息值的数据。特定值（例如化合物名称）用作表标题。
- “**分组**”：详细信息行根据给定关键信息的不同值（例如不同的样品名称）进行排列。
- “**排序**”：详细信息行根据给定关键信息进行排序。
- “**筛选**”：从表内容中排除特定数据。
- “**最小面积**”：排除过小的峰的信息。
- “**显示峰类型**”：指定将在表中显示的峰类型（例如，“标识的峰”或“未知峰”）。

“报告项目”浏览器中的提供的表式报告项目全部按特定方式预配置，以便您只需少数几下调整即可使用它们。

使用表

添加和删除列

在“编辑窗格”中（拖放）：

- 1 选择“编辑窗格”中的表。
- 2 在“报告项目”浏览器的“字段”类别中，选择要添加到表中的信息，然后将字段拖动到表中。

当您将鼠标移动到表列时，RTE 会选中相应的列。释放鼠标按钮时，RTE 将新列添加到当前选定的列的右侧。

在“编辑窗格”中（上下文菜单）

- 1 在“编辑窗格”中，选择要在其边上添加新列的列。
- 2 右键单击该列，然后从上下文菜单中选择“将列插入到左侧”或“将列插入到右侧”。


此时打开一个包含所有数据类别的子菜单。这些类别中包含的所有数据字段可用于当前模板的报告类型。

- 3 选择要在新的表列中显示的数据字段。

在“表属性”对话框中：

- 1 选择表。
- 2 在“表属性”中，选择“列”页。
- 3 在“可用字段”树状图中双击所需的数据字段。

或

您也可以选择字段，再单击 。


对应的表列即会插入到所选列的右侧。

删除列

在“编辑窗格”中：

- 1 在“编辑窗格”中，选择要删除的表列。
- 2 右键单击列，然后从上下文菜单中选择“删除列”。

在“表属性”对话框中：

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 在“表格布局”中，单击所需的列将它选中。
- 3 单击 。

即从表格中删除了该列。

更改表列的顺序

在“编辑窗格”中：

- 1 选择“编辑窗格”中的表。
- 2 在标题字段顶部的暗灰色栏中，选择列，并将它拖动到新的位置。
拖动列时，新的位置将用蓝色细线表示。

在“表属性”对话框中：

- 1 打开“表属性”对话框中。
- 2 选择“列”页。
- 3 在标题字段顶部的暗灰色栏中，选择列，并将它拖动到新的位置。
拖动列时，新的位置将用蓝色细线表示。

调整列宽度

对于包含任何类型的值的列：

- 1 选择“编辑窗格”中的表。
- 2 在标题字段顶部的暗灰色栏中，用鼠标拖动列边框。

对于包含字符串值的列：

- 1 选择“编辑窗格”中的表。
 - 2 在“表属性”中，选择“列”页。
 - 3 选择要调整的列。
 - 4 单击“列属性”。
- “列属性”对话框随即打开。
- 5 在“列属性”对话框中，选择“值格式”页。
 - 6 在“列宽”字段中，输入所需的宽度（字符数）。
 - 7 保存设置。

调整表中的颜色和字体

您可以使用下列选项调整表中使用的颜色和字体：

- 为整张表选择一个表格样式。
- 为特定的列或整张表手动设置颜色和字体。您可以分别为表头和表数据设置颜色 / 字体。
- 为特定的列配置条件格式（请参见第 30 页的“用条件格式高亮显示离群值”）。

设置会按照此处显示的顺序应用。因此，表样式的优先级低于颜色和字体的指定，而后的优先级则又低于条件格式。

要选择一种表格样式，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“格式”页。
 - 2 在“格式样式”列表框中，选择一种样式。
- “预览”下即会显示对应的外观。
- 3 保存设置。

要为整张表设置颜色和背景，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“样式”页。
- 2 在“所有列的数据字体属性”，调整表数据的设置。
- 3 在“所有列的标题字体属性”，调整表标题的设置。
- 4 保存设置。

要为特定的列手动设置颜色和背景，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 选择要更改其颜色或字体的列。
- 3 单击“列属性”。
“列属性”对话框随即打开。
- 4 在“列属性”中，选择“字体”页。
- 5 调整表数据和表标题的设置。
- 6 保存设置。

用条件格式高亮显示离群值

例如，您可以使用条件格式高亮显示数据概述中的离群值，用不同的颜色或字体显示超出指定范围的值或符合特定条件的值。

- 1 在“列属性”中，选择“条件格式”页。
- 2 滚动到要用于高亮显示离群值的颜色或字体属性。例如，如果要将粗体字用于离群值，则滚动到“字体粗细”部分。
- 3 输入用于决定条件的表达式。例如，如果要高亮显示所有大于 4 的化合物量，则输入下列表达式：

表达式	运算	值
Compound_Amount	>	4

表达式为真时激活指定的格式。

- 4 保存设置。

调整表边框

您可以使用下列选项调整表边框：

- 为整张表选择一个表格样式。表格样式确定内边框和外边缘的样式。
- 手动配置表的外边缘。手动设置的优先级高于表格样式设置。

要选择一种表格样式，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“格式”页。
- 2 在“格式样式”列表框中，选择一种样式。
“预览”下即会显示对应的外观。
- 3 保存设置。

要配置表的外边缘，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“样式”页。
- 2 调整默认设置，或各个边框的设置。
- 3 保存设置。

更改列标题

要直接在“编辑窗格”中更改标题，请执行以下操作：

- 1 在“编辑窗格”中双击表标题。
您现在可以直接编辑标题文本。
- 2 要确认新文本，请按 Enter 键，或单击标题外区域。

要在“表属性”中更改标题，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 在“表格布局”中，双击要编辑的标题。
您现在可以直接编辑标题文本。
- 3 要确认新文本，请按 Enter 键，或将鼠标移动到“可用字段”区域。

要在“列属性”中更改标题，请执行以下操作：

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 选择要调整的列。

- 3 单击“列属性”。
- “列属性”对话框随即打开。
- 4 在“列属性”对话框中，选择“值”页。
- 5 在“标题”下方，更改“标题文本”字段中的文本。
- 6 保存设置。

在表标题中插入换行符

如果要在表标题中添加换行符，您可以使用 `vbNewLine` 常量（由 Visual Basic 提供）。例如，如果您要在 `Retention` 和 `Time` 两个词之间添加一个换行符，表标题中的表达式会像如下所示：

```
= "Retention" + vbNewLine + "Time"
```

此类型的换行符不会在“编辑窗格”中显示，但在生成报告时会予以应用。

创建第二个表行

在表头上创建第二行

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
 - 2 在“多个表行”菜单下，选中“启用附加表头行”复选框。
 - 3 选择希望设置标题的列，然后单击“列属性”。
 - “列属性”对话框随即打开。
 - 4 在“值”页面，在“附加表头文本”字段中为第二个表头提供表头文本。
 - 5 在“表头格式”页面，配置表头的格式。
- 两个表行将具有一样的格式。

在表明细位置创建第二行

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 在“多个表行”菜单下，选中“启用附加表明细行”复选框。
- 3 选择希望设置标题的列，然后单击“列属性”。

注意

我们推荐仅为第一列使用一个表明细行，仅将第二个表行添加至其他列。这使得在生成的报告中更容易识别表行之间的归属关系。

“列属性”对话框随即打开。

4 在“值”页面，在“附加值”字段中为第二个表头提供一个表达式。

5 在“值格式”页面，配置两个明细行的格式。

两个明细行的基本格式信息是一致的。但是，您可以为每一明细行设置不同的数字格式。

6 在“汇总计算”页面，您可以为每一明细行配置特定的汇总计算。从下拉列表中选择您希望配置的明细行。

但是，为了更好地概述结果，我们推荐仅为一个特定的明细行创建汇总计算。

7 在“条件格式”页面，您可以单独设置每一明细行的格式。从下拉列表中选择您希望配置的明细行。

您可以单独设置每一明细行的格式。从下拉列表中选择您希望配置的明细行。

Name	RT [min]	Area	Height	RF	Amount [ng/ul]
	Width	Area %	Height %	Tail Factor	Type
Uracil	1.355	32.5637	19.8944	0.34477	11.227
	0.024	8.7571	12.1936	0.70556	BB
Ethyl paraben	5.062	53.4534	24.3948	0.25073	13.402
	0.034	14.375	14.9520	1.0723	BB
Propyl paraben	5.897	48.8092	21.6386	0.27072	13.214
	0.035	13.126	13.2627	1.0765	BB
Heptyl paraben	8.806	61.0532	25.2993	0.39365	24.034
	0.037	16.419	15.5064	1.1023	BB

图 1 双行表示例

更改表中文本对齐方式

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 选择要调整的列。
- 3 单击“列属性”。
“列属性”对话框随即打开。
- 4 要调整表头的对齐方式，请选择“表头格式”页。要调整值的对齐方式，请选择“值格式”页。
- 5 根据需要调整水平 / 垂直对齐和其他的单元格属性。
- 6 保存设置。

调整表中的数字格式

- 1 在“表属性”中，选择“列”页。
- 2 选择要调整的列。
- 3 单击“列属性”。
“列属性”对话框随即打开。
- 4 在“列属性”对话框中，选择“值格式”页。
- 5 在“数字格式”下方，根据您的需要调整设置。
“预览”区域显示当前所选设置的外观。

注意

只有在选定的列中包含数字时，“数字格式”部分才会处于可见状态。

- 6 保存设置。

配置表的页脚

可以向表的页脚添加多种函数。这些函数汇总整个表中的数据。

- 1 选择要汇总的列，然后单击“列属性”。
“列属性”对话框随即打开。
- 2 在“列属性”对话框中，选择“汇总计算”页。
- 3 选择要在表尾中使用的函数。每个函数将出现在单独的行中。
- 4 调整所用的各个函数的数字格式。
 - a 在“用于汇总计算的数字格式”下方，选择相关的函数。
 - b 根据需要调整数字格式。“预览”区域显示当前所选设置的外观。
- 5 保存设置。

所选的函数即作为表尾行添加到表中。每个函数在其自己的表尾行中显示。

注意

添加汇总计算时，表会在生成的模板中向下扩展。但是，在编辑窗格中，报告项目的版面不会自动调整！您需要重新调整表版面的大小，以容纳新增的表尾行。否则在生成的模板中，后面的报告项目会覆盖这个表尾。

注意

如果某个表列显示包含计算变量或报告参数的表达式，则无法为该列添加汇总计算。

对表排序

您可以为列举多条信息的任何报告项目（如表或复合组）提供排序表达式。此过程说明如何更改表的排序表达式，但它基本上也适用于其他的报告项目。



- 1 在属性对话框中，选择“排序”页。
- 2 在“表达式”下拉列表中，选择要用于排序的数据字段。

例如，您可以按照下列表达式进行排序：

- “字段” > “峰” > “保留时间”（如果要按照保留时间排序）
- “字段” > “样品” > “订单号”（如果要按照其中发生进样的订单排序）

3 表 使用表

将会显示各个数据字段的正确名称，并在前面加上一个等号。例如：
“=Peak_RetentionTime”。

- 3 在“方向”下拉列表中，选择要以升序还是降序的顺序排列条目。
- 4 若需要，您也可以添加表达式，按照多个字段进行排序。
排序表达式将自上而下进行应用。
- 5 若需要，使用箭头按钮  和  更改排序表达式的顺序。

筛选表

如果要创建一张仅显示特定数据的表，您需要对表执行相应的筛选。此过程演示如何筛选样品名称、样品类型或化合物名称。

- 1 在“表属性”中，选择“筛选”页。
- 2 在“表达式”下拉列表中，选择要用于筛选的数据字段：
 - “字段” > “样品” > “名称”（如果要筛选特定的样品名称）
 - “字段” > “样品” > “类型”（如果要筛选特定的样品类型）
 - “字段” > “化合物” > “名称”（如果要筛选特定的化合物名称）

将会显示各个数据字段的正确名称，并在前面加上一个等号。例如：
=Sample_Name。

- 3 在“运算”下拉列表中，选择“等于”。
- 4 选择“值”字段。
如果开始键入，会替换掉字段中全部的现有内容。如果按 F2 键，则会显示光标；您可以编辑现有的内容。
- 5 输入所需的值。

注意

在“值”字段中，必须将文本字符串用引号括起，以将其识别为文本。如果您没有添加引号，RTE 会在您关闭对话框时帮您添加。

书写数字时不要带引号。

注意

如果要筛选枚举，则必须在“值”字段中输入所需的数目。有关所有枚举的概述，请参见第 150 页的“枚举”。

例如：

- "Standard L1" 为样品名称
- 1 为样品类型，本例中为标样
- "TRAMADOL" 为化合物名称

6 单击“确定”以确认设置。

生成的报告所显示的表中现在仅包含通过筛选条件的数据。由于编辑器使用内置的示例数据在“编辑窗格”中预览表，预览中可能不会包含任何内容。

筛选峰面积或面积百分比

排除小峰

- 1 在“表属性”中，选择“峰和重复”页。
- 2 在“拒绝面积”下方，选中复选框，以排除面积或面积百分比小于指定值的峰。
- 3 输入面积或面积百分比的值。此值将用作最小值。只有面积或面积百分比等于或大于该值的峰才会包含在报告中。

排除大峰

- 1 在“表属性”中，选择“筛选”页。
- 2 输入筛选表达式，以筛选面积或面积百分比等于或大于特定值的峰。例如，您可以使用下列表达式：

表达式	运算	值
=Peak_Area	>=	3
=Peak_AreaPercent	>=	3

注意

在“编辑窗格”中重新载入模板后，RTE 会自动将筛选条件映射到“拒绝面积”属性。您使用大于 (>) 或等于 (=) 运算符时也会如此。筛选表达式即会从“筛选”页中删除，而显示在“峰和重复”页中。

重复表

此过程演示如何按照化合物名称重复表。

- 1 在“表属性”中，选择“峰和重复”页。
- 2 在“重复表打开”下拉列表中，选择“字段” > “化合物” > “名称”
将会显示相应数据字段的名称，并在前面加上一个等号：=Compound_Name.
- 3 单击“确定”以确认设置。

在“编辑窗格”的表预览中，该化合物名称会添加一个标题。生成报表时，会为当前范围中的各个可用化合物名重复该表。

关于表组

使用表组，可以安排表中详细信息行的结构。您可以定义特定标题行，使用该组特定的摘要信息显示脚注行。

例如，如果您使用两个检测器波长用于信号检测，则对于每个被检测的化合物，您可以获取两个信号。在此情况下，您可以为检测器波长创建一个表组，以便彼此叠加的显示各个波长的所有信号，上面显示一个组页眉，详细信息行下显示汇总脚注。

RT	Compound Name	Area	Area%	Resol. USP	Tail Factor
	*** SIGNAL ***				
0.877	o-desm tramadol (D)	0.121	0.0791	0.122	1.4
0.878	o-desm tramadol (D)	0.1178	0.0759	0.117	1.2
1.432	trans- tramadol (A)	0.1397	0.0989	0.23	0.9
1.565	TRAMADOL	729.3899	262.0219	1015.418	2.4
2.519	des-hyd cis tramadol (C)	0.1674	0.1157	0.192	1.2
2.644	des-hyd trans tramadol (B)	0.1491	0.1087	0.22	0.9
	Sum	730.0849	262.5002		
	Avg			169.383	1.3
	*** SIGNAL ***				
1.565	TRAMADOL	209.7591	75.4511	1015.418	2.2
1.566	TRAMADOL	209.6631	74.9885	1014.953	2.3
	Sum	419.4222	150.4396		
	Avg			1015.185	2.3

表组的使用限于最多 3 个组。分组的顺序由列表中组的位置来定义。

两个组将与报告模板中的标题 / 脚注行一起显示，第 3 组将仅用于组织表中的详细信息行。

使用表组的准备

使用表组可能会使表变得相当复杂，尤其是在有多个组的情况下。提前计划表组并准确了解组将如何安排数据的结构非常重要。否则，可能会产生意外结果，并且您将不知道必须更改哪个组的哪些属性才能纠正表。

创建表组之前，请遵循以下指导：

- 报告模板中的顶级元素是什么？使用此元素用于“**重复表打开**”设置。
- 哪个字段应用于对详细信息数据分组？哪个（静态）子标题应用于组？使用此信息用于表组中的“**分组形式**”设置。
- 哪些字段应用于对每个组内部的详细信息数据进行排序？在表本身的属性中使用此信息。表排序将改写表组排序。
- 每个表组需要哪些脚注？使用标题或脚注是可选的。这可能有助于提供有关特定表组的统计信息汇总。

使用表组

配置表组

- 1 在“表属性”中，选择“分组”页。
- 2 单击“添加”，创建一个新表组。
“组属性”对话框随即打开。会自动生成“组名”。
- 3 在“组属性”中，提供一个“分组形式”表达式。
该表达式会用于分组表的明细行。
- 4 如果需要：选择“列”页，再指定组页眉和组页脚信息。
要创建组页眉，请在“组页眉”列中输入字符串。要创建组页脚，请选择一个或多个所提供的复选框。
- 5 如果需要：选择“筛选”页，再指定用于不同组值的筛选表达式。
- 6 如果需要：选择“排列”页，再指定用于不同组值的排序表达式。此排序可不同于表明细行的排序！

注意

表组数据的排序仅应用于各个组，而表中不同组的顺序取决于表的排序。

3 表 使用表组



4 矩阵

关于矩阵	44
关于矩阵组	45
使用矩阵	47
创建矩阵	47
对矩阵排序	48
调整列宽度	48

本章描述 RTE 中矩阵的特性和用法。



关于矩阵

矩阵类似于电子表格中的旋转透视表或交叉表。如以上各章中所见，表包含可变数量的行（具体取决于数据集内容），以及固定数量的带有详细信息的列。但是，矩阵还包含可变数量的列。列的数量取决于数据集的内容。例如，在表中，可以显示特定进样中找到的所有化合物的列表，列显示每种化合物的特定属性（如含量和保留时间）。在矩阵中，可以显示所有进样的列表；列的数量对应于进样样品中检测到的化合物的数量。

			trans-tramadol (A)		TRAMADOL		o-desm tramadol (D)		des-hyd trans tramadol	
			RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount
LOD	P1-F-06	1	1.4360	0.5157			0.8777	0.5265	2.6431	0.47
Sample 1	P1-E-01	1	1.4320	0.2299	1.5655	1015.4178	0.8776	0.1580	2.6409	0.1E
		2	1.4321	0.1922	1.5662	1014.9529	0.8774	0.1627	2.6444	0.21

注意

如果数据包含多个信号，则报告模板编辑器中的矩阵项目将仅显示主信号。

关于矩阵组

关于矩阵，最重要的是矩阵中的所有内容都基于组。与表相反，矩阵包含两种不同类型的组：行组和列组。在“报告项目”浏览器中提供的段中，这些行组和列组已经预配置。您只能部分更改这些设置。可以更改的选项可能因段而异。

行组

行组定义矩阵左侧部分中的数据。如果矩阵包含多个行组，则此左部分中有多个特定列，每个列由其自己的行组定义。下图显示这一原理：

			des-hyd cis tramadol (C)		des-hy (B)
			RT	Amount	
LOD	P1-F-06	1	2.5181	0.5367	2.6431
Sample 1	P1-E-01	1	2.5158	0.2029	2.6409
		2	2.5189	0.1918	2.6444
Sample 2	P1-E-02	1	2.5180	0.7292	2.6435

行组 1: 样品名称

行组 2: 瓶号

行组 3: 进样序号

图 2 行组

行组的数量和对应列的宽度由段定义。您不能在报告模板编辑器中更改这些设置。

列组

列组定义组成矩阵右部分中的列的数据。在某些矩阵段中，您可以调整用于构建列的值。下图显示这一原理：

列组：化合物名称

			trans- tramadol (A)		TRAMADOL		o-desm tramadol (D)		des-hyd trans tr	
			RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount
LOD	P1-F-06	1	1.4360	0.5157			0.8777	0.5265	2.6431	0.47
Sample 1	P1-E-01	1	1.4320	0.2299	1.5655	1015.4178	0.8776	0.1580	2.6409	0.16
		2	1.4321	0.1922	1.5662	1014.9529	0.8774	0.1627	2.6444	0.21

图 3 列组

数据属性

详细信息数据始终显示在由行组和列组定义的单元格中。详细信息单元格可以拆分，以便显示属于相同组的多个不同值。这些多个详细信息单元格可按列（并列）显示，也可以按行（上下并排）显示。布局类型由段定义，并且在报告模板编辑中不能更改。详细信息单元格的数量及其内容可以在矩阵属性中配置。

Sample Type: Calibration			
0.88	o-desm tramadol (D)	Area	Standard L1
		Amount	Standard L1
1.43	trans- tramadol (A)	Area	0.0555
		Amount	0.0869

图 4 上下并排显示的详细信息单元格

			trans- tramadol (A)		TRAMADOL
			RT	Amount	
LOD	P1-F-06	1	1.4360	0.5157	
Sample 1	P1-E-01	1	1.4320	0.2299	1.5655
		2	1.4321	0.1922	1.5662

图 5 并列显示的详细信息单元格

使用矩阵

创建矩阵

利用可用的矩阵段，您可以创建不同情境的概要：

- 利用“化合物汇总 (RT 量)”段，可生成检测到的每种化合物的保留时间和量的概要。化合物会显示为列；样品名称、样品瓶位置和进样次数会显示为行。段中还包括页脚中的汇总计算（平均值、标准偏差和相对标准偏差）。

			trans-tramadol (A)		TRAMADOL		o-desm tramadol (D)		des-hyd trans tramadol (C)	
			RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount	RT	Amount
LOD	P1-F-06	1	1.4360	0.5157			0.8777	0.5265	2.6431	0.47
Sample 1	P1-E-01	1	1.4320	0.2299	1.5655	1015.4178	0.8776	0.1580	2.6409	0.1E
		2	1.4321	0.1922	1.5662	1014.9529	0.8774	0.1627	2.6444	0.21

- 有两个“示例汇总”段。利用这些字段，可以生成每个样品的保留时间和化合物量的概要。样品名称会显示为列；化合物名称及其各自的保留时间显示为行。

Sample		Sample							
		Sampl...	Sampl...	Sampl...	Sampl...	Sampl...	Sampl...	Sampl...	Sampl...
0.88	o-desm tramadol (D)	Area 0.1178	0.1210		0.4496	0.1995	0.1873		0.14
		Am... 0.1166	0.1216		0.6434	0.2463	0.2270		0.16
1.43	trans-tramadol (A)	Area 0.1397		0.4159	0.4208	0.1824	0.1770		0.16
		Am... 0.2299		0.6877	0.6959	0.3007	0.2917		0.26
1.57	TRAMADOL	Area 209.7591	209.6631	208.2385	208.6522	210.9145	211.1662	208.3515	210.3
		Am... 1015.4...	1014.9...	1008.0...	1010.0...	1021.0...	1022.2...	1009.0...	101E
2.52	des-hyd cis tramadol (C)	Area	0.1674	0.6072	0.5773	0.2813	0.2639	0.4843	
		Am...	0.1918	0.7292	0.6927	0.3309	0.3097	0.5784	
2.64	des-hyd trans tramadol (B)	Area	0.1491	0.4272	0.4375	0.1946		0.3340	
		Am...	0.2195	0.6332	0.6486	0.2872		0.4901	

- “示例汇总面积数量”段不会在特定字段上重复。因此，它会在同一概要中显示所有样品。如果存在很多样品，则矩阵宽度可能会变得很大。此内容摘要通常用于获取特定样品组的概要。
- “示例汇总 (按类型)”会在“样品类型”上重复。这样，矩阵会重复若干次，而每一个重复只会显示相同类型的样品。

对矩阵排序



没有针对矩阵自身的可用“排序”页。任何排序信息均必须针对各自的行组或列组分别提供！

- 1 在“矩阵属性”中，选择“分组”页。
- 2 要更改行组的排序顺序，请在“行”部分中单击“编辑”。要更改列组的排序顺序，请在“列”部分中单击“编辑”。
有关行组和列组的详细信息，请参见第 45 页的“关于矩阵组”。
- 3 选择“排序”页。
- 4 在“表达式”下拉列表中，选择要用于排序的数据字段。

例如，您可以按照下列表达式进行排序：

- “字段” > “峰” > “保留时间”（如果要按照保留时间排序）
- “字段” > “样品” > “订单号”（如果要按照其中发生进样的订单排序）

将会显示各个数据字段的正确名称，并在前面加上一个等号。例如：
“=Peak_RetentionTime”。

- 5 在“方向”下拉列表中，选择要以升序还是降序的顺序排列条目。
- 6 若需要，您也可以添加表达式，按照多个字段进行排序。
排序表达式将自上而下进行应用。
- 7 若需要，使用箭头按钮  和  更改排序表达式的顺序。

调整列宽度

您既可以调整矩阵左侧部分中显示的静态列宽度，也可以调整矩阵右侧部分中动态创建列的宽度。

更改静态列的宽度：

- 1 在“矩阵属性”中，选择“分组”页。
- 2 选择合适的行组，然后单击“编辑”。
- 3 在“组属性”中，选择“格式”页。
- 4 为列宽输入合适数目的字符。
- 5 保存设置。

更改动态创建列的宽度：

- 1 在“矩阵属性”中，选择“数据”页。
- 2 选择相应的列，然后单击“列属性”。
- 3 在“列属性”中，选择“格式”页。
- 4 在“列宽”下，输入合适的列宽数值（以磅为单位）。

4 矩阵

使用矩阵



5 复合组

关于复合组	52
使用复合组	53
创建复合组	53
重复复合组	54
创建嵌套的复合组	54
筛选复合组	54

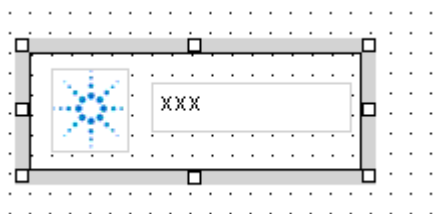
本章描述 RTE 中复合组的特性和用法。



关于复合组

复合组是始终在一起使用的任何类型的报告项目的聚合。在“报告项目”浏览器中，可在“序列”类别和“样品”类别中找到预定义复合组。这些组包含有关序列或样品的基本标题信息的数据字段的集合。

在编辑窗格中，复合组由包围的矩形标记。



本地保存

如果在报告模板编辑器中保存复合组，则复合组将在“报告项目”浏览器的“复合组”类别下列出。然后您可以为其他报告模板重用该复合组。

与复合组相关联的 xml 文件保存在本地文件系统中，因此您可以将 xml 文件传输到其他计算机，然后也在那里重用复合组。位置取决于主机应用程序和操作系统。例如，如果使用的是 OpenLAB CDS ChemStation 版本和 Windows XP，xml 文件保存在 `C:\Documents and Settings\[username]\Application Data\Agilent Technologies\Agilent ChemStation\[version]\IntelligentReporter\CompositeGroups` 中。

重复打开

复合组可对特定的关键信息重复。然后多次显示整个组，对于所选信息的每个值显示一次。例如，包含有关样品信息的组可对序列中的每个样品重复。

复合组对应于 Microsoft Business Intelligence Studio 中的列表。

使用复合组

创建复合组


先决条件 您已将若干个报告项目放置在始终应一起使用的模板中。它们可能为任何类型的报告项目，包括其他复合组。

准备组：

1 选择您要组合在一起以构成复合组的所有报告项目。可以用不同的方法来选择多个报告项目：

- 将鼠标拖至相关项目之上。
- 或者 -
- 选择第一个项目，然后按住 Ctrl 键并依次单击其他所需的项目。

现在已选定全部所需的项目。

2 在工具栏中单击 。

添加了矩形，其中包含选定的报告项目。

3 要配置组属性，请右键单击组内任意位置，然后从上下文菜单中选择“属性”。谨防单击任何特定报告项目，因为此操作会选择相应的特定项目而不是组。

“复合组属性”对话框随即打开。

保存组：

1 右键单击组内任意位置，然后从上下文菜单中选择“保存复合组”。谨防单击任何特定报告项目，因为此操作会选择相应的特定项目而不是组。

2 输入合适的组名称。

注意

不能覆盖现有复合组。保存复合组时，您必须始终提供新名。

现在，新复合组在“复合组”类别下的“报告项目”浏览器中可用。

重复复合组

以下过程演示如何在样品名称上重复复合组。

- 1 在“复合组属性”中，选择“分组”页。
- 2 在“组重复”下拉列表中，选择“字段” > “样品” > “名称”。
将显示各个数据库字段的名称，并在前面加上一个等号：“=Sample_Name”。
- 3 单击“确定”确认设置。

创建嵌套的复合组

复合组可能包含任何类型的报告项目，甚至包含其他复合组。这样，创建的嵌套组中的外部组可能会在样品类型上重复，而嵌套组中的内部组可能会在样品名称上重复。以下过程演示如何创建嵌套的组。

- 1 利用样品名称上重复的样品信息创建并保存复合组（请参见第 53 页的“创建复合组”）。
- 2 将字段“样品类型”添加到模板中。将其置于以前创建的复合组中。
- 3 同时选择“样品类型”字段和以前准备的复合组。
- 4 创建包含两个选定项目的新复合组。
- 5 在“样品类型”上重复该新复合组。

如果生成报表，则不同的样品类型会显示为标题。在每个样品类型下，会列出各个样品。

注意

在 Microsoft Business Intelligence Studio 中，嵌套的复合组与“列表中的列表”相关联。

筛选复合组

只有复合组在特定值上重复时，对复合组的筛选才会处于激活状态。

如果需要筛选根本不重复的复合组，请输入表达式 `=-1` 作为“组重复打开”值。在 `-1` 的情况下，复合组只会显示一次，但是筛选会处于激活状态。



6 图像

关于图像 56

本章描述 RTE 中图像的特性和用法。

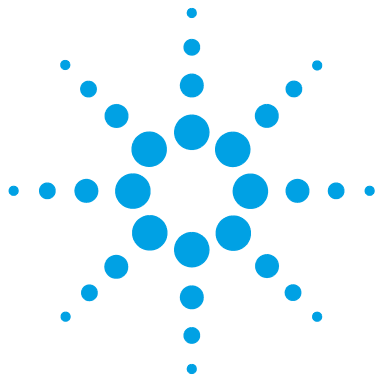


关于图像

RTE 为您提供了向报告模板添加图像（如公司徽标）的可能性。图像通常被添加到报告标题中，但您也可以将其放置在报告正文或报告脚注中。

在“报告项目”浏览器中的“特殊对象”类别下可找到图像项目。默认图像为 Agilent 徽标，但您可以在“图像属性”对话框中更改图像来源以及图像大小。当您将预定义图像项目拖到模板上时，图像来源的文件选择对话框会自动打开。

如果保存一个在其中使用图像项目的模板，此图像将自动添加到当前模板的“特殊对象”中。因此，如果要还在同一模板中的不同位置添加该图像，您可以轻松访问同一图像。



7 色谱

关于色谱	58
使用色谱图	61
仅显示特定样品或信号	61
仅显示特定样品类型	62
同样标识缺失的化合物	63
根据峰打开 / 关闭峰标记	63
仅显示特定最小范围内的峰	64
测量特定化合物的峰高	64
创建单峰图谱	65
创建多页图谱	66
显示仪器曲线	66

本章描述 RTE 中色谱的特性和用法。



关于色谱

使用色谱报告项目，您可以在报告中打印来自色谱系统检测器的信号。报告项目显示所选数据中包含的所有进样的结果。每个进样有至少一个信号。如果检测器被配置成提供多个测量（例如二极管阵列或多波长检测器），则色谱相应地在每个进样中包含多个信号。

注意

色谱中显示的数据还取决于色谱是否放置在复合组中并取决于复合组的分组和筛选。

根据报告项目的配置，信号可能显示在单独的图形、重叠图形、堆积图形中或作为 Iso 图。

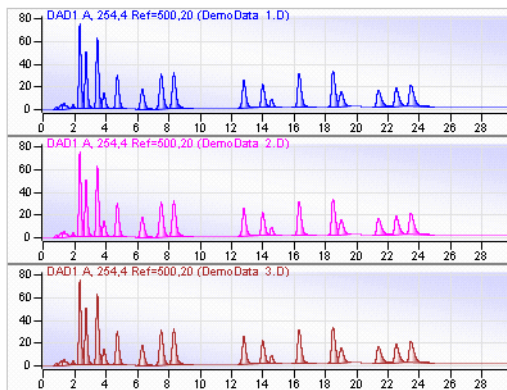


图 6 例如：三个信号在单独图形中的色谱

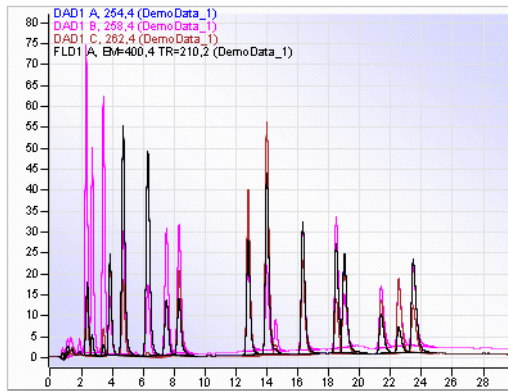


图 7 例如：多个信号在一个覆盖图形中的色谱

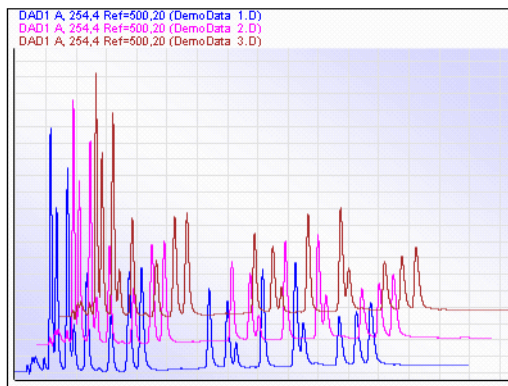


图 8 例如：多个信号在一个堆叠图形中的色谱

7 色谱 关于色谱

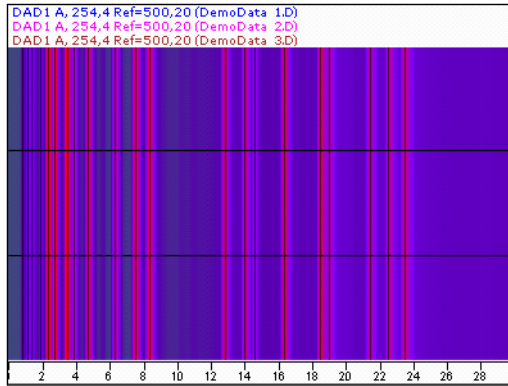


图 9 例如：多个信号显示为 iso 图的色谱

单信号图和多信号图

在“报告项目”浏览器中，为色谱提供了不同类型的段：

- “单信号图”段始终仅显示一个检测器信号。色谱在信号 ID 上自动重复。因此，如果数据包含多个信号（如来自多个进样或来自多波长检测器），则色谱将重复多次。
- “多信号图”段显示同一色谱报告项目中的所有信号。您可以配置显示格式和组设置。

使用色谱图

仅显示特定样品或信号

特定样品 如果要在色谱中仅显示特定样品的信号（此处为：样品 SSRS1），您可以筛选该样品名称。

表达式	运算	值
=Sample_Name	=	"SSRS1"

为了比较两个不同样品的信号，请为其他样品名称添加第二个表达式。这两个表达式将由 **Or** 自动链接。另外，您也可以在“值”字段中使用“包含”操作符和通配符：

表达式	运算	值
=Sample_Name	包含	"SSRS1 *"

特定信号 如果只想从特定探测器中显示信号，则可以筛选该探测器名称（此处为：DAD1）。该检测器名称通常包含在信号名称的前几个字符中。因此，请筛选其名称中包含相关字符的所有信号。

表达式	运算	值
=Signal_Name	包含	"DAD1"


如果要筛选一个特定信号，请在筛选器表达式中使用完整的信号名称（此处为：DAD1 A, Sig=270, 8 Ref=500, 100）。

表达式	运算	值
=Signal_Name	=	"DAD1 A, Sig=270, 8 Ref=500, 100"

仅显示特定样品类型

此过程演示如何创建仅显示特定样品类型样品的重叠色谱。

为每个样品类型创建一个色谱：

- 1 将数据字段“字段” > “样品” > “类型”添加到报告模板中。
- 2 将“多个信号重叠”段添加到报表模板中。
- 3 选择两个项目并单击  以创建一个复合组。
- 4 在“样品类型”上重复该复合组。
- 5 如果您使用了多个信号，请筛选一个特定信号的色谱。例如，筛选表达式将为：

表达式	运算	值
信号名称	包含	“DAD 1A*”

为一个样品类型创建仅包含一个色谱的模板：

- 1 将“多个信号重叠”段添加到模板中。
- 2 筛选样品类型，如果需要的话，筛选特定信号。例如，筛选表达式将为：

表达式	运算	值
样品类型	=	3
信号名称	包含	“DAD 1A*”

注意

如果筛选枚举（如“样品类型”），则必须在“值”字段中输入所需的数字。有关所有枚举的概述，请参见第 150 页的“枚举”。

同样标识缺失的化合物

默认情况下，在色谱中仅对已定义的化合物进行标识。如果要在各个保留时间为缺失的化合物添加标签，则执行如下操作：

- 1 在“多个信号图属性”中，选择“峰标签”页。
- 2 确保已选中“显示峰标签”复选框。
- 3 选中“未检测到化合物”复选框。
- 4 保存设置。

注意

“编辑窗格”中的报告项目预览基于内置数据，而不是基于实际所选的数据。因此，未检测到化合物的标签只有在生成报告之后才可见。

根据峰打开 / 关闭峰标记

如果要根据特定峰属性来标识峰，则必须为峰标签创建自定义表达式。

- 1 在“多个信号图属性”中，选择“峰标签”页。
- 2 确保已选中“显示峰标签”复选框。
- 3 在“峰标签”下，为标签 2 到 4 选择“无标签”。
- 4 单击“函数...”，为“标签 1”创建自定义表达式。
“表达式编辑器”随即打开。
- 5 根据您的要求，输入下列表达式之一。

表达式	说明
<code>=Iif(Peak_Area> 5, Str(Round(Peak_RetentionTime, 2)), "")</code>	显示舍入到两位小数的保留时间，但仅针对计算面积大于 5 的峰。
<code>=Iif(UCase(Compound_Name)="TRAMADOL", "*** 找到的 Tramadol ***", "")</code>	显示 Tramadol 峰的标签 "*** 找到的 Tramadol ***"。所有其他峰均保持没有标签的状态。

- 6 保存设置。

仅显示特定最小范围内的峰

如果仅显示特定最小范围内的峰，则可以筛选峰面积。例如，您可以仅显示范围 % 大于 5 的峰。

表达式	运算	值
=Peak_AreaPercent	>	5

注意

如果所有峰均被筛选掉，则不会显示任何信号。

测量特定化合物的峰高

如果要测量特定化合物的峰高，且您不知道其他化合物有多少以及峰高是多少，则可以使用自定义表达式来测量正确的峰。

- 1 在“多个信号图属性”中，选择“信号轴”页。
- 2 在“量程”下，选择“所有信号都位于给定量程”。
- 3 单击“至”字段右侧的“函数...”。
“表达式编辑器”随即打开。
- 4 输入以下表达式：

表达式	说明
=Iif(UCase(Compound_Name)="TRAMADOL", Peak_Height*1.05, "")	此表达式会返回 Tramadol 峰高乘以 1.05 所得的结果。在该方法中，可将“Tramadol”写为大写或小写。

- 5 保存设置。

创建单峰图谱

- 1 创建在“峰 ID”上重复的一个复合组（请参见第 53 页的“创建复合组”“”）
利用该组，您可确保每个色谱只显示一个峰。

注意

如果要仅为一种化合物创建单个峰图，则可以筛选所需化合物的复合组。

- 2 将一个色谱添加到复合组中。
- 3 配置该色谱的“信号轴”。
 - a 在“量程”下，选择“所有信号都位于给定量程”。
 - b 针对信号轴的上限，输入以下表达式：

用于	表达式	说明
至	$=\text{Peak_Height} * 1.05$	此表达式会返回峰高乘以 1.05 所得的结果。

- 4 有多种不同的方法来配置“时间轴”页。如果进行了以下设置，信号轴就会标记有绝对值，且每个图标的上限均会与每个峰高相对应。
 - a 在“比例”下，选择“具有相同缩放尺寸的所有时间轴”，然后选中“自定义范围”复选框。
 - b 针对时间轴的下限和上限，输入以下表达式：

用于	表达式	说明
从	$=\text{Round}(\text{Peak_BeginTime} - 0.05 * (\text{Peak_EndTime} - \text{Peak_BeginTime}), 1)$	此表达式会返回峰开始时间减去峰持续时间的 5% 所得的结果。
至	$=\text{Round}(\text{Peak_EndTime} + 0.05 * (\text{Peak_EndTime} - \text{Peak_BeginTime}), 1)$	此表达式会返回峰结束时间加上峰持续时间的 5% 所得的结果。

- 5 保存设置。

创建多页图谱

如果要将一个色谱划分为两部分，则需要将两个色谱项目添加到报告模板中。如果将两个色谱放置在一个复合组内，请确保把它们全放在其中。而且，每个色谱的筛选条件必须相同。

两个色谱之间的唯一差异在于时间范围：

- 第一个色谱：从 0 到 50%（或到 52.5%，以获取小的重叠）
- 第二个色谱：从 50 到 100%（或从 47.5%，以获取小的重叠）

注意

创建多页图时，认真考虑您针对信号轴的量程选择“检索范围在以下范围内”下的哪个选项。如果选择“给定的时间轴范围”选项，您将会获取每个独立图的不同信号轴。

显示仪器曲线

可以根据使用的模块显示各种仪器曲线。此过程演示如何向报告中添加泵压仪器曲线。

- 1 在“色谱图属性”中，选择“仪器曲线”页。
- 2 选中“包括仪器曲线”复选框。
- 3 在“筛选列表”下，单击“表达式”字段。
将自动设置表达式“信号名称”。
- 4 在“运算”字段中，选择“包含”。
- 5 在“值”字段中，输入
压力。
- 6 保存设置。
- 7 预览报告。

报告中的每个色谱图包含关联的压力曲线。如果使用两个泵，将显示两个压力曲线。

显示格式（例如“覆盖”或“单独的”）取决于“色谱图属性”的“多个信号”页中的设置。

注意

为了找出哪些其他仪器曲线可用，请在“仪器曲线”页中删除所有筛选器，然后预览报告。图例中显示了可用信号名称。



8 校正曲线

关于校正曲线	68
使用校正曲线	70
创建校正曲线	70
将多条曲线放置在一行中	72

本章描述 RTE 中校正曲线的特性和用法。



关于校正曲线

使用校正曲线，您可以将校正结果以可视化方式放置在报告模板中。图形显示所选数据中包含的所有化合物和校正样品的结果。

注意

为获得校正曲线，您必须在序列中将各样品配置为校正样品，并且必须已配置校正表。

根据报告项目的配置，可能在单独图形、重叠图形或堆积图形中显示多个曲线。

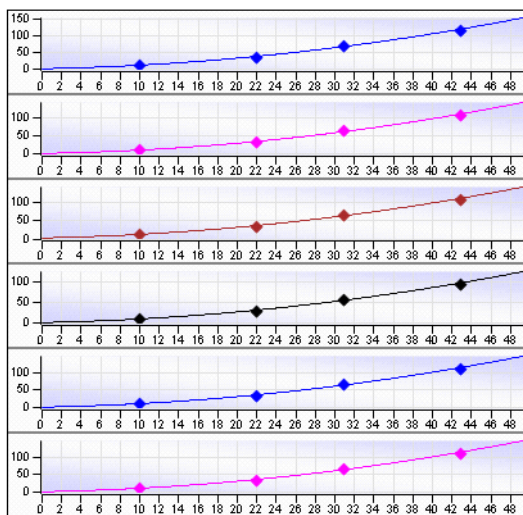


图 10 例如：带单独图形的校正曲线

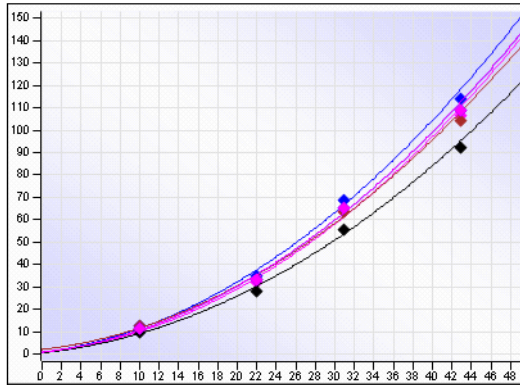


图 11 例如：覆盖图形中的校正曲线

校正曲线的类型

在“报告项目”浏览器中，为校正曲线提供了以下段：

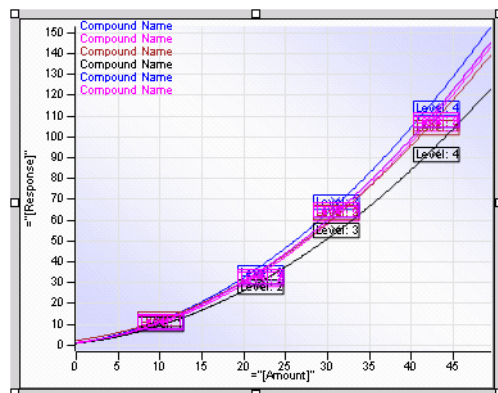
- “校正曲线图（按化合物）”包含一个带校正曲线和附加信息（如公式或校正系数）的复合组。复合组对化合物名称自动重复。因此，如果数据包含多个校正化合物，则信息将重复多次。
- “校正曲线重叠显示”添加单个校正曲线项目。在此项目中，当前范围（由数据选择、分组、筛选等定义）中包含的所有曲线将在同一图形中重叠显示。您可以配置显示格式和组设置。

使用校正曲线

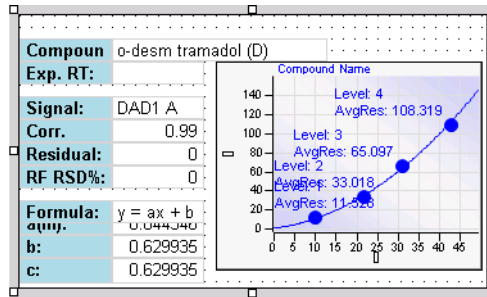
创建校正曲线

利用可用校正曲线段，可以为不同情境创建校正曲线。请参见以下示例：

- 要利用来自多种化合物的数据创建重叠校正曲线，只需将“校正曲线重叠显示”段添加到报告中即可。该报告仅显示一个图表，其中所有化合物的曲线均被覆盖。



- 要显示单种化合物的校正曲线，可以选择以下方法：
 - 添加“校正曲线重叠显示”段，并筛选所需化合物的校正曲线项目（例如，“化合物名称”=“TRAMADOL”）。在报告中仅会显示一个校正曲线。
 - 添加“校正曲线图（按化合物）”段。将显示在化合物名称上重复的复合组。该复合组还包含有关校正曲线的更多信息，如公式或相关系数。



注意

如果利用非匹配校正表处理某个 ChemStation 数据文件，则报告会显示空校正曲线，且未标识任何峰。如果已针对一个信号设置了校正表，则会发生这种情况，但是已对不同信号的数据进行了记录。确保校正表中的信号描述与使用过的方法设置的 DAD 信号完全匹配（例如 DAD1A 254, 4 Ref 360, 600）。

将多条曲线放置在一行中

默认情况下，校正曲线彼此上下堆叠显示。不过，您可以配置报表项目，以便在同一行中并列显示多条曲线。

将多条曲线放置在一行中

- 1 将校正曲线报表项目添加到模板中。
- 2 在“校正曲线属性”中，选择“多条曲线”页。
- 3 在“显示格式”下，选择“单独的”。
- 只有单独的图表才会并排显示在同一行中。
- 4 在“校正曲线属性”中，选择“布局”页。
- 5 在“# 图形”字段中，输入要在一行中显示的曲线数。例如，输入 4 可在一行中显示 4 条曲线。
- 6 保存设置。

给定曲线数此时会显示在同一行中。

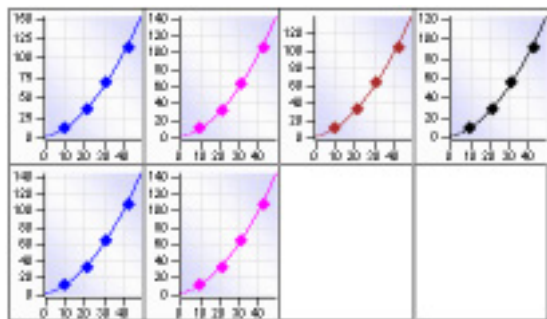
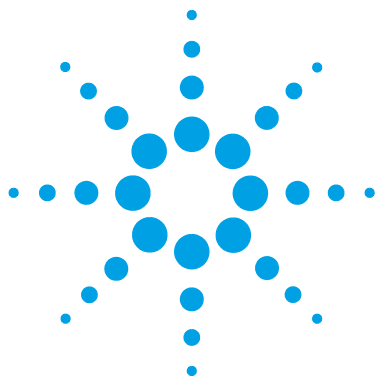


图 12 同一行中有 4 条校正曲线

概念指南



9 光谱

关于光谱	74
使用光谱	76

本章描述 RTE 中光谱的特性和用法。



关于光谱

使用光谱报告项目，可以将光学 3D 检测器（如二极管阵列检测器）的视觉输出放置在报告模板中。图形中显示的光谱对应于每个峰中的位置选择。例如，您可以在峰的起点、顶点或结束位置提取光谱。此外，您可以使用过滤器列表筛选光谱中显示的数据。

根据报告项目的配置，多个光谱可能显示在单独图形、覆盖图形、堆叠图形中或作为 Iso 图。如果有不同化合物的光谱，则可以按化合物名称对光谱分组。

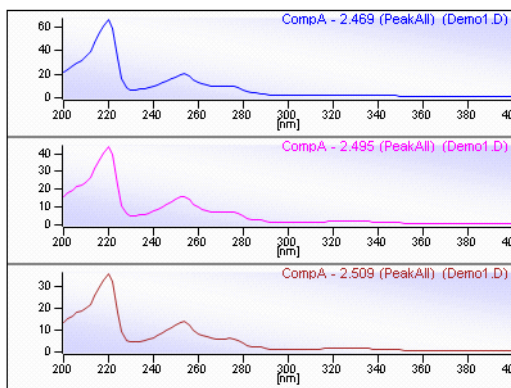


图 13 例如：单独图形中的三个光谱

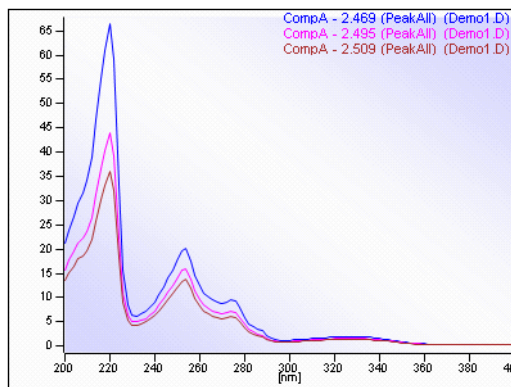


图 14 例如：覆盖图形中的三个光谱

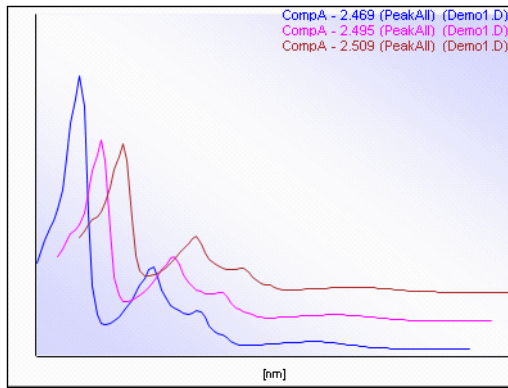


图 15 例如：堆叠图形中的三个光谱

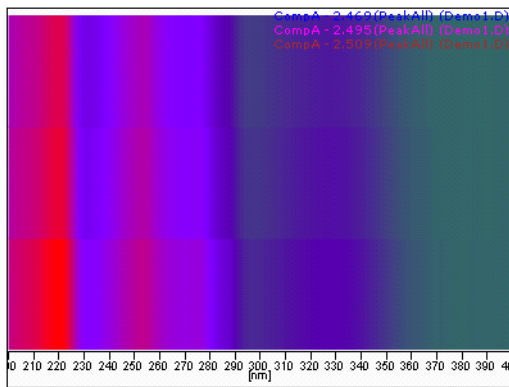
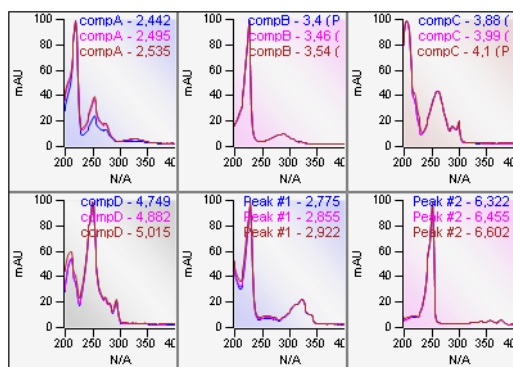


图 16 例如：显示为 Iso 图的三个光谱

使用光谱

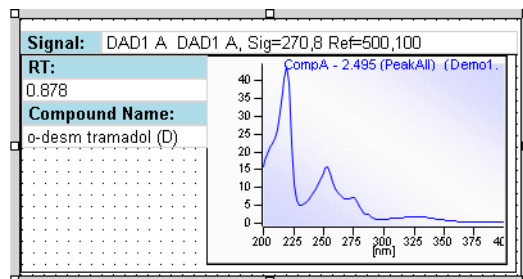
利用可用光谱段，可以为不同情境创建图形：

- “光谱图”段中包含一个图，其中的所有可用光谱均会以覆盖格式显示。默认情况下，光谱按峰分组，从同一峰选择的多个光谱在覆盖图形中显示。

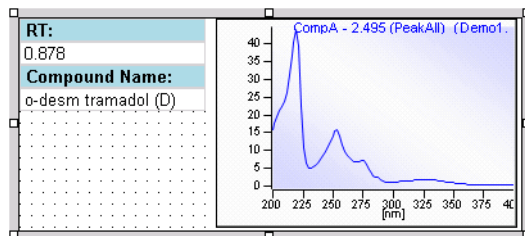


此段通常与在特定信息上重复的复合组结合使用，具体取决于您的要求。例如，可以创建按样品名称重复的复合组；在该复合组中，“光谱图”段将针对每个峰显示一个图形，以及当前样品所有进样的覆盖光谱。

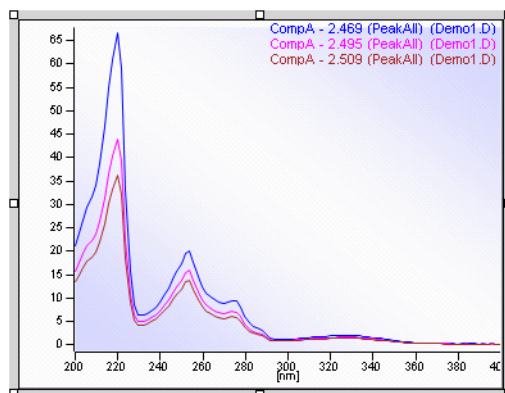
- “光谱图中的所有峰”段包含嵌入到两个复合组之中的一个图。第一个复合组在单个名称上重复，第二个复合组在峰 ID 上重复。因此，您可以获取针对每个峰和信号的单个光谱。



- “光谱图（化合物）”段包含嵌入到单个复合组之中的一个图。复合组在峰 ID 上重复，且它还包含每个峰的保留时间和化合物名称。如果存在多个信号，则此段仅会使用主信号的峰。



- “按峰分组的光谱图”段按峰重复，也就是为生成报告中的每个峰显示一次全部报告项目。您无法在报告项目属性中删除按峰重复。从同一峰选择的多个光谱显示在覆盖图形中。



9 光谱

使用光谱



10 图表

关于图表	80
准备数据	82
种类组	83
系列组	87
使用图表	88
更改图表标题和轴标题	88
更改 y 轴上绘制的值	88
更改 y 轴标签	88
更改 x 轴上绘制的值	89
更改 x 轴标签	89
更改图例标题	90
更改系列标签	90
在同一图表中绘制不同 y 值	91

本章介绍 RTE 中图表的特性和用法。



关于图表

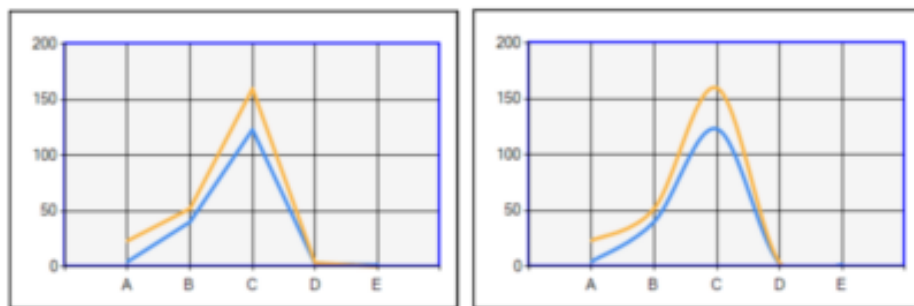
图表对于以图形形式来显示数据非常有用。就像在表或矩阵中一样，您可以展示集合起来的数据。

RTE 中可以使用以下图表类型：

- 线形图

在线形图中，通过用直线连接各个值，可以形象地表示出各类数据。类别值常在 x 轴上表示。例如，您可以按样品名称、校正级别或化合物名称来分类数据。不同系列的数据以不同颜色的线条来表示。

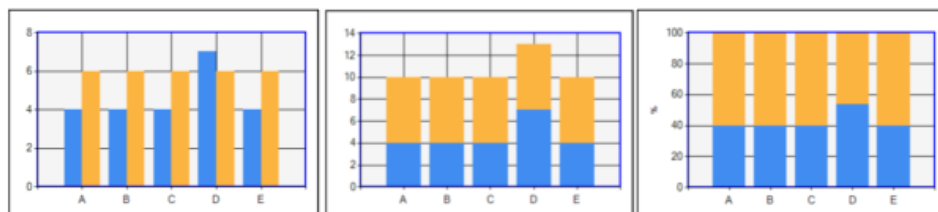
“折线”和“平滑线”：



- 柱形图

柱形图与线形图很相似。也可以形象化地表示各类数据，但数据显示为竖条，而不再是连接起来的线条。类别值常在 x 轴上表示。例如，您可以按样品名称、校正级别或化合物名称来分类数据。不同系列的数据以不同颜色的竖条来表示。

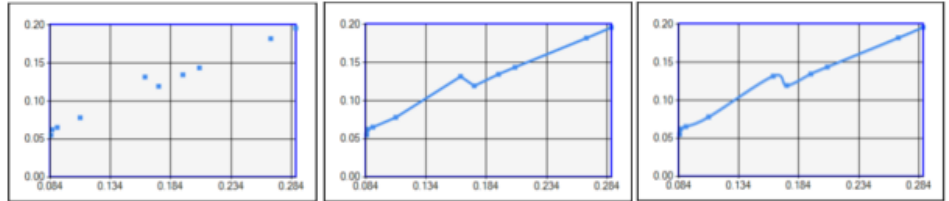
“簇状柱形图”、“堆积柱形图”和“百分比堆积柱形图”：



- 散点图

在散点图中，数据点的位置由 x 轴和 y 轴的值共同确定。x 轴的值通常为数值或日期 / 时间值。例如，您可以在准确度图中表示出化合物量占峰面积的比率。

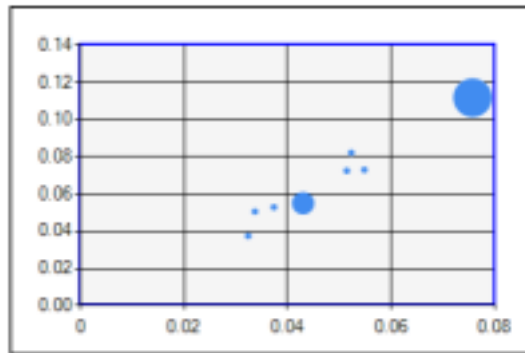
“散点图”、“折线散点图”和“平滑线散点图”：



- 气泡图

跟在散点图中一样，数据点的位置由 x 轴和 y 轴的值共同确定。此外，气泡大小取决于一个单独的数值。

“气泡”：



准备数据

使用图表，尤其是散点图和气泡图，可能会比较复杂。要事先计划好轴向比率、种类组和系列组表达式，并准确了解它们将如何来构造您的数据。否则，可能会产生意外结果，并且您将不知道必须更改哪些属性才能纠正结果。

注意

图表中所显示的数据也同样取决于报告类型以及该图表是否放置在复合组中：

- 在单个进样报告中，整个模板内容在每个进样中都重复一遍。这样，在单个进样报告中就无法在同一图表中比较来自多个进样的数据。
- 在复合组中，您可以对将在图表中使用的数据进行分组、排序和筛选。

在创建图表前，请阅读并了解以下内容：

- 哪种图表类型能满足您的要求？
 - 如果您想用 x 轴表示样品 1、样品 2、样品 3 之类的字符串值，那么通常可以创建线形图或柱形图。
 - 如果您想用 x 轴来表示保留时间或化合物量等数值，那么一般可以创建散点图或气泡图。
- 您想在图表中显示多少数据点？例如，每个样品一个，每个化合物一个，或者每个峰一个？用哪个表达式来区分数据？种类组使用此表达式。
- 是否需要区分由种类组所集合起来的数据？例如，尽管种类组可以区分样品名称，但您使用了两种信号并希望每种信号和样品名各显示一个数据点。那么可使用附加表达式（在本例中，为信号名）作为系列组表达式。
- 是否需要筛选数据？例如，对数据进行筛选以便只显示特定的化合物或只显示特定的信号。
- 您想用 y 轴表示什么值？这些值必须是数值。我们建议使用聚合函数，因为种类组可能含有多个值。
- 对于散点图和气泡图：您想用 x 轴表示什么值？x 值通常为数值或日期 / 时间值。但也可以用 x 轴坐标显示文本值。

注意

对于线形图和柱形图，类别值等同于 x 轴值。对于散点图和气泡图，种类组只对所显示的数据量产生一定影响，x 轴值是单独设定的，可以不同于类别值。

- 是否需要对其进行排序？我们建议使用相同的表达式来对种类组进行排序和分组。线形图和柱形图在 x 轴上对标签进行排序。由于散点图使用线条，这些线条按照种类组所给定的顺序来连接起各个数据点。
- 对于气泡图：由哪种值来影响气泡的大小？

种类组

在**所有**类型的图表中，种类组都对所显示的数据量具有一定影响。您可以选择将多个数据子集组合到一起的种类组表达式。例如，如果数据中包含多个同一样品的多个进样，那么您可以选择样品名称作为分组表达式。图表就会为每种不同样品只显示一个数据值，如平均化合物量。

种类组对 x 轴标签的影响取决于图表类型：

- 对于**线形图**和**柱形图**，类别值等同于 x 轴值。
- 对于**散点图**和**气泡图**，种类组只对所显示的数据量产生一定影响，x 轴值是单独设定的，可以不同于类别值。

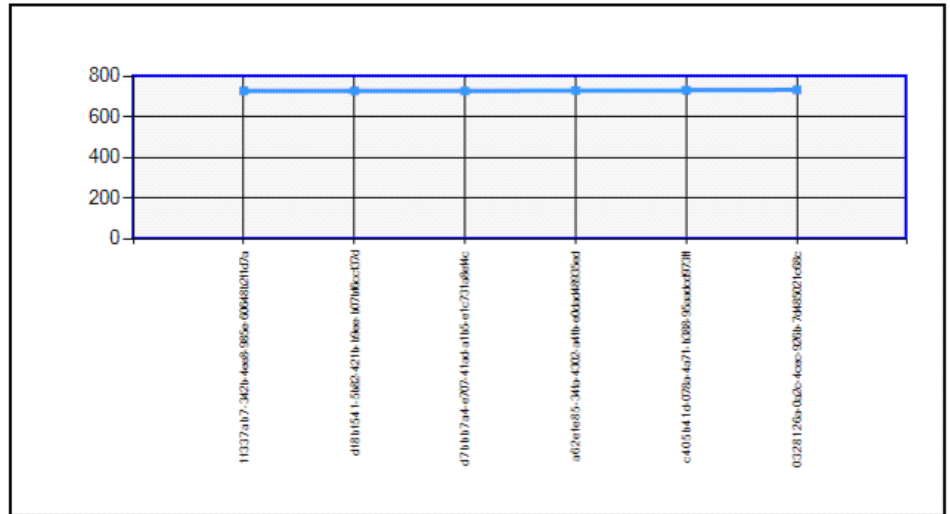
类别组示例

例如，您的数据可能包含 3 种样品，每种样品曾进样 2 次。如果选择 “= 进样 ID” 作为分组表达式，那么图中就将含有 6 个数据点。如果选择 “= 样品 ID”，图中就会只有 3 个数据点。每个数据点都可以显示比如 2 个峰面积的平均值。

- 具有以下设置的线形图：

y 轴值：=Peak_Area

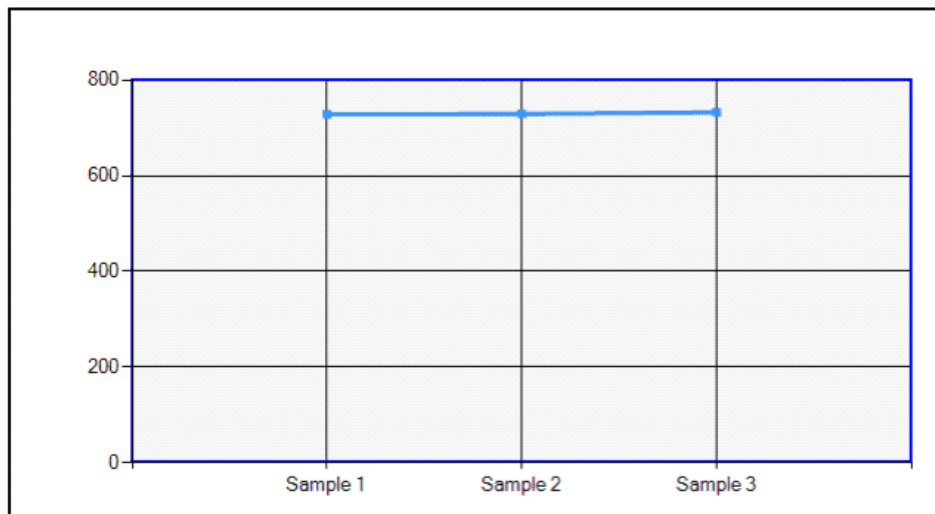
类别组表达式：=Injection_ID



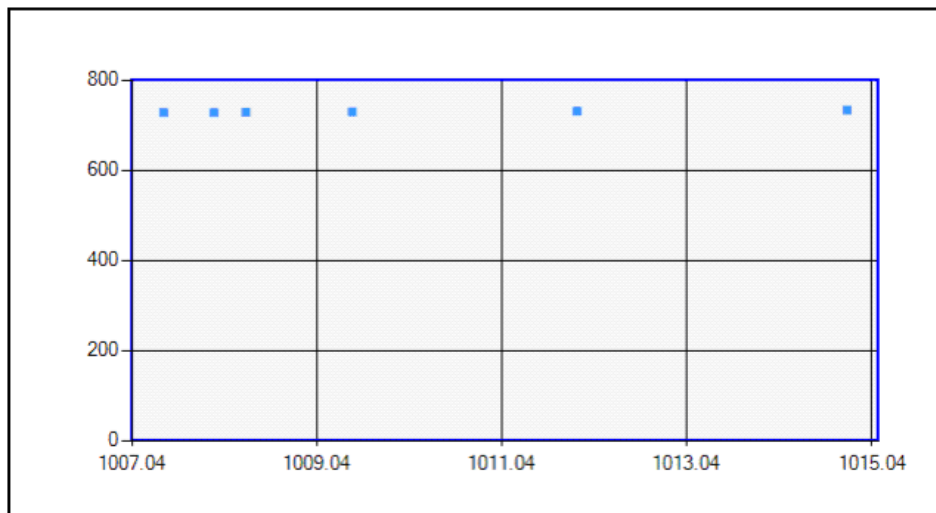
10 图表

关于图表

- 具有以下设置的线形图：
y 轴值：=Avg(Peak_Area)
类别组表达式：=Sample_ID



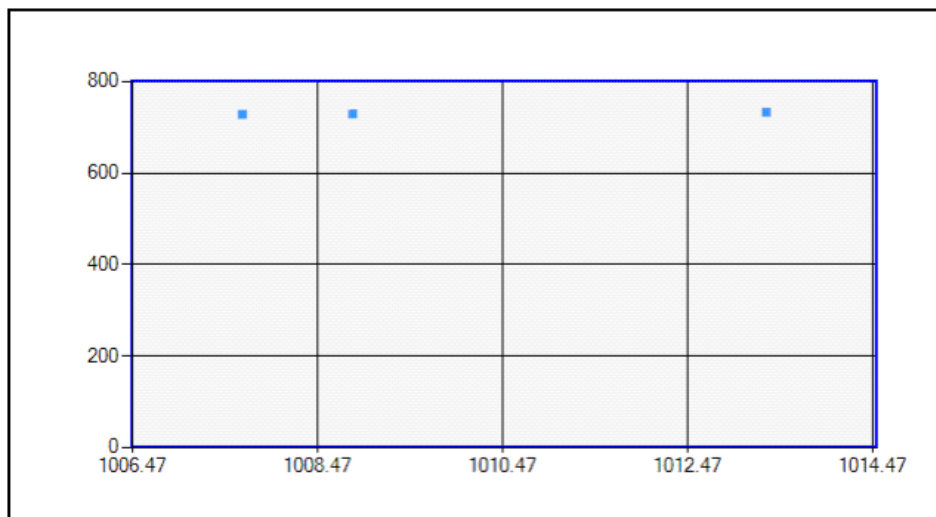
- 具有以下设置的散点图：
y 轴值：=Peak_Area
x 轴值：=Compound_Amount
类别组表达式：=Injection_ID



10 图表

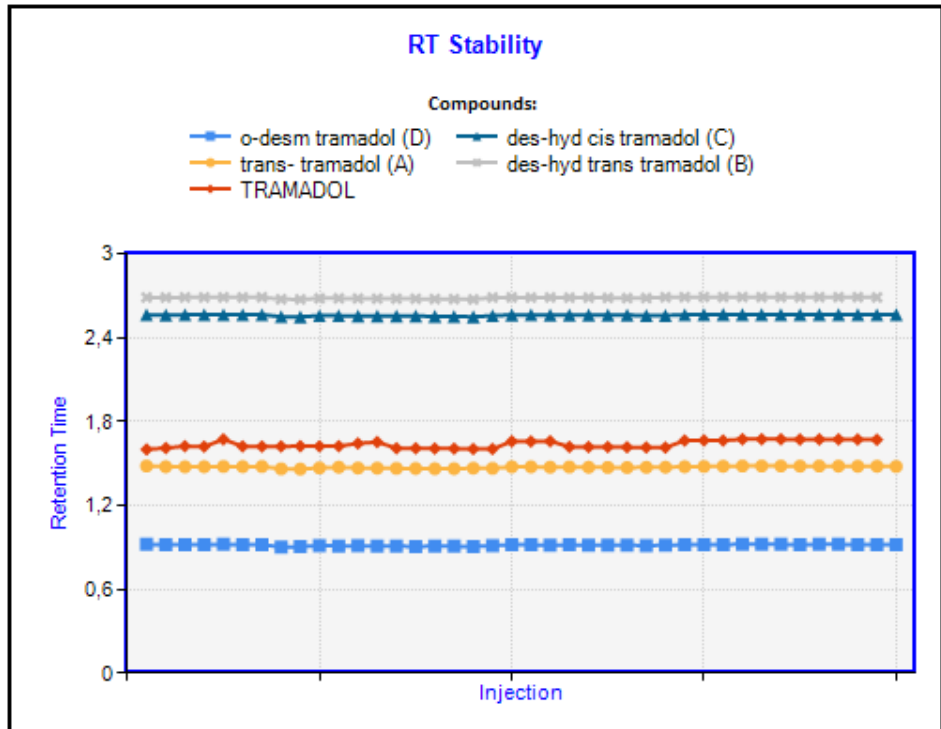
关于图表

- 具有以下设置的散点图：
 - y 轴值: =Avg(Peak_Area)
 - x 轴值: =Avg(Compound_Amount)
 - 类别组表达式: =Sample_ID



系列组

您可以将若干个系列的数据放到同一图表中。例如，您可能想创建一个图表来显示一组进样的保留时间的稳定性。如果有若干种化合物，您可以将每种化合物用一条单独的线来表示。在这种情况下，可以基于进样 ID 来创建种类组，而系列组则按化合物名称来划分。结果可能类似于下面的线形图。



Y 轴值：= “峰保留时间”

y 轴标签格式代码： F1

种类组表达式：= “进样 ID”

类别排序依据：= “进样采集日期”



系列组表达式：= “化合物名称”

使用图表

更改图表标题和轴标题

- 1 在“图表属性”中，选择“图表”页。
- 2 在“标题”下，单击要更改的标题的“函数”按钮。
- 3 在“表达式编辑器”中，输入标题。可以使用不带等号的静态标题或以等号开头的动态表达式。
- 4 保存设置。

更改 y 轴上绘制的值

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“数据值” / “选择 Y 值”下，选择需要在 y 轴上绘制的数据字段或表达式。由于 y 值必须是数值，因此只有返回数值的数据字段才在列表中可用。
- 3 单击  将所选表达式移动到显示在右侧的活动设置。
- 4 选择右侧的以前使用过的表达式，单击  将其从活动设置中删除。
- 5 保存设置。

更改 y 轴标签

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“数据值”下，单击“数据值属性”。
- 3 在“数据值属性”中，选择“标签”页。
- 4 如果想要完全隐藏 y 轴标签，请清除“显示 Y 轴标签”复选框。
- 5 如果想要对 y 值表达式定义的数字使用另一种格式，请单击“fx”输入所需的格式代码（请参见第 108 页的“格式代码”）。
- 6 保存设置。

更改 x 轴上绘制的值

对于折线图或柱形图

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“种类属性” / “选择 X 轴的分组”下，选择需要在 x 轴上绘制的数据字段或表达式。

该表达式既用于对数据分组，也用于为 x 轴加标签。该表达式可以返回字符串值或数值。

- 3 保存设置。

对于散点图和气泡图

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“数据值” / “选择 X 值”下，选择需要在 x 轴上绘制的数据字段或表达式（通常为数值）。
- 3 保存设置。

更改 x 轴标签

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“种类组”下，单击“种类属性”。
- 3 在“种类属性”中，选择“标签”页。
- 4 如果想要完全隐藏 x 轴标签，请清除“显示 X 轴标签”复选框。
- 5 对 x 轴标签使用表达式取决于图表类型：

- 对于折线图和柱形图：

如果希望使用与种类组表达式生成的标签不同的标签，请单击“函数”并在“表达式编辑器”中输入所需的表达式。

使用基于与种类组表达式标识相同的标识的表达式。例如，如果种类是基于样品 ID 分类的，您可以显示样品名称。显示序列名称或进样序号可能导致 x 轴标签产生混淆。

- 对于散点图和气泡图：

如果想要对 x 值表达式定义的数字使用另一种格式，请单击“函数”输入所需的格式代码（请参见第 108 页的“格式代码”）。

- 6 保存设置。

更改图例标题

- 1 在“图表属性”中，选择“图例”页。
- 2 在“可见性”下，确保选中“显示图例”和“显示图例标题”复选框。
- 3 单击“函数”输入图例标题。
- 4 保存设置。

更改系列标签

检查系列标签类型

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“数据值”下，单击“数据值属性”。
- 3 在“数据值属性”中，选择“标签”页。
- 4 检查“显示系列表达式”复选框的状态。

如果清除此复选框，RTE 将使用默认系列标签，例如“系列 1”、“系列 2”、“系列 3”等。

如果选中此复选框，RTE 将使用系列标签的动态表达式。请执行下列步骤更改该表达式。

- 5 保存设置。

更改系列标签的表达式

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“系列组”下，单击“系列属性”。
- 3 在“系列属性”中，选择“标签”页。
- 4 单击“函数”更改表达式。

默认情况下，该表达式为空。对于空的系列标签表达式，系列标签是使用“图表属性”中的“数据字段”页中的系列表达式构建的。

- 5 保存设置。


在同一图表中绘制不同 y 值

种类组和系列组表达式定义了基本数据集。但是，您可以提供多个表达式作为 y 值，因而可以为相同的数据绘制不同的 y 值。

- 1 在“图表属性”中，选择“数据”页。
- 2 在“种类组”下，选择种类组表达式。
- 3 如果需要，在“系列组”下选择系列组表达式。

注意

由于多个 y 值与多个系列值的显示方式相同，同时使用这两个选项会使图表过于拥挤。

- 4 在“数据值” / “选择 Y 值”下，选择所需的数据字段，并单击  将其移动到活动设置。
- 5 如果需要：在“数据值” / “选择 X 值”下，选择与 y 值相同数量的数据字段。可以多次选择同一 x 值表达式。X 值仅适用于散点图和气泡图。
- 6 如果需要：在“数据值” / “选择尺寸”下，选择与 y 值相同数量的尺寸表达式。可以多次选择同一尺寸表达式。尺寸表达式仅适用于气泡图。
- 7 保存设置。

10 图表

使用图表



11 方法信息

关于方法信息	94
筛选特定部分	95

本章介绍 RTE 中方法信息表达式的特性和用法。



关于方法信息

有了“方法信息”段，您可以向报告中添加所用方法的信息。其包括方法参数和仪器设置的信息，例如信号、流速或压力限值等。

方法信息最多能分为五个级别。每一级别都可以含有单独的数据字段和表，或二者的组合。每一级别的内容取决于生成方法文件的系统。每一级别的数据以具有特定区域名称的区域来组织。您可以用这些区域名称来创建筛选表达式。

筛选特定部分

找出在哪一级包含区域

- 1 在“方法属性”中，选择“设定值”页。
- 2 仅选择一个级别。
- 3 保存设置。
- 4 生成报告。
- 5 检查所需的区域是否包括在报告中。如果不包括，请在下一级重复该过程。

注意

如果清除了较高的级别且只选择了一个较低的级别（例如，级别 5），报告仍将包含较高级别中包含的区域名称。只显示所选级别的详细信息。如果还想隐藏该区域，则需为所需区域创建一个筛选器即可。

筛选所需的区域

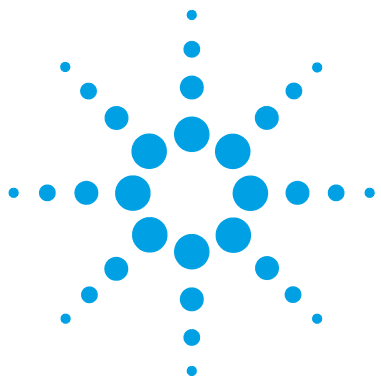
如果您只想显示特定区域，可为区域名称创建筛选器，步骤如下所述。这样会删除所有区域，包括与筛选表达式不匹配的子区域。

- 1 在“方法属性”中，选择“筛选”页。
- 2 在上述标识的级别下，为所需的区域创建筛选器表达式。筛选器表达式始终为“区域名称”。
例如：SECTION NAME=Signals
- 3 保存设置。

11 方法信息

筛选特定部分

概念指南



12 仪器信息

早期维护预警 (EMF) 计数器 98
仪器模块 98



12 仪器信息

早期维护预警 (EMF) 计数器

早期维护预警 (EMF) 计数器

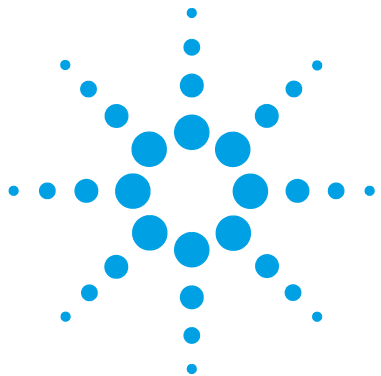
特定 GC 仪器驱动程序提供早期维护预警 (EMF) 信息。该信息包括，例如，前进样口隔垫的进样数、带色谱柱运行的数目、或灯打开的合计时间。如果该值超出了服务期限限值，则 EMF 计数器会返回**已超出值**的信息。具体的键和值取决于仪器驱动程序。

仪器模块

“仪器模块”段（仅适用于 ChemStation 环境）显示的是模块的信息，诸如模块名称、序列号或固件版本。

注意

无法配置“仪器模块”代码段。因为没有可用的“属性”对话框。



13 表达式

关于表达式	100
操作符	101
函数	102
格式代码	108
使用表达式	110
使用变化的表示法筛选数据（大小写敏感）	110
筛选空字段	110
对具有特定前缀的样品名称重复	111
使用 Iif 函数比较数字	112
显示进样类型	113
筛选日期和时间	114
利用自定义字段计算	114
相对标准偏差	115
筛选类似名称	115
仅显示部分值	116

本章介绍 RTE 中表达式的特性和用法。



关于表达式

表达式用于定义数据字段或文本字段项目的值、表列中显示的值、特定属性（如项目的背景色）或许多其他目的。最基本的表达式是引用特定数据字段，但表达式还可以包含有关不同数据字段的数学函数。

表达式始终以等号开头。最基本的表达式是引用特定数据字段（如序列名称：`=Sequence_Name`）的表达式。

但是，在模板开发过程中，可能需要创建更复杂的表达式。例如，可以筛选带有某个前缀的样品名称，比较数字与某个阈值，或使用自定义公式从一个值计算另一个值。

RTE 附带的“表达式编辑器”有助于您构建包含数据字段和逻辑或数学函数的动态表达式。

注意

所有表达式以 Microsoft Visual Basic 编写。因此，可以使用 Visual Basic 中提供的任何函数。唯一的后果可能就是如果 RTE 不能对所使用的函数建模，则表达式编辑器将显示一条红色锯齿线。另外，属性对话框或编辑窗格中对报告项目的预览可能不能正常显示。不过，生成报告模板时，函数仍可正常使用。

关于 Microsoft Visual Basic 的更多信息，请见
<http://msdn.microsoft.com/en-us/library/sh9ywfkd.aspx>。

注意

在“表达式编辑器”中，函数或数据字段的表示法不区分大小写。

操作符

算术

表 1 算术

名称	语法	说明
^	NUMBER [^] POWER	将一个数添加到另一个数的幂中。
*	NUMBER1*NUMBER2	将两个数相乘。
/	NUMBER1/NUMBER2	将两个数字相除并返回一个浮点结果。
Mod	NUMBER1 Mod NUMBER2	将两个数相除，并且只返回余数。
+	NUMBER1 + NUMBER2	将两个数字相加。
-	NUMBER1 - NUMBER2	从一个数中减去另一个数，或指示数值表达式的负值。

比较

表 2 比较

名称	说明
<	小于
<=	小于或等于
>	大于
>=	大于或等于
=	等于
<>	不等于
Like	比较两个字符串。要与其比较的字符串必须包含通配符： <ul style="list-style-type: none"> • ? 匹配任意单个字符。 • * 匹配任意数量的相邻字符。

13 表达式

关于表达式

逻辑

表 3 逻辑

名称	说明
And	对两个布尔表达式执行逻辑关联。
Not	对布尔表达式执行逻辑非操作。
Or	对两个布尔表达式执行逻辑分离。

串联

表 4 串联

名称	说明
&	生成两个表达式的字符串连接。
+	连接两个字符串。

函数

程序流程

表 5 程序流程

名称	语法	说明
Choose	choose (NUMBER, "argument_1", "argument_2", [...], "argument_n")	从一组参数中选择并返回一个值。
Iif	Iif (CONDITION, THEN-VALUE, ELSE-VALUE)	根据对条件的评估, 返回两个值中的一个值。

集合

表 6 集合

名称	语法	说明
Avg	Avg (FIELDNAME)	返回指定字段的所有非空值的平均值。
Count	Count (FIELDNAME)	返回指定字段的非空值的计数。
CountDistinct	CountDistinct (FIELDNAME)	返回指定字段的不同值的计数。
CountRows	CountRows ()	返回行数，包括带有空值的行。
Max	Max (FIELDNAME)	返回指定字段所有值中的最大值。
Min	Min (FIELDNAME)	返回指定字段所有非空值中的最小值。
StDev	StDev (FIELDNAME)	根据总体方差的示例返回非空值的标准偏差： $s = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$
StDevP	StDevP (FIELDNAME)	根据总体方差返回非空值的标准偏差： $s = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$
Sum	Sum (FIELDNAME)	返回指定字段的值的总和。
First	First (FIELDNAME)	返回指定字段的第一个值。
Last	Last (FIELDNAME)	返回指定字段的最后一个值。

注意

相对标准偏差没有特定函数。必须手动计算为 (Stdev/Avg*100)。

集合函数始终引用某范围内的所有记录并仅返回一个值。该值从这些记录计算或根据特定条件选择。因此，集合函数自动用于表头或表尾等的创建。如果需要汇总数据，可以使用集合函数。

数学

表 7 数学

名称	语法	说明
Abs	Abs (NUMBER)	返回单精度浮点数的绝对值。
Exp	Exp (POWER)	返回添加到指定幂中的 e。
Log	Log (NUMBER)	返回指定数的自然对数（以 e 为底）。
Log10	Log10 (NUMBER)	返回指定数的以 10 为底的对数。
Pow	Pow (NUMBER, POWER)	返回添加到指定幂中的指定数。
Round	Round (NUMBER)	将双精度浮点值舍入为最接近的整数。
Sqrt	Sqrt (NUMBER)	返回指定数的平方根。
Int	Int (NUMBER)	返回通过截断（而不是舍入！）所提供的数字获取的整数。

转换，日期 / 时间

表 8 转换、日期 / 时间

名称	语法	说明
Cstr	Cstr (...)	转换为字符串
Val	Val ("198th Street")	返回字符串中包含的数值类型的数字。如果字符串中不包含任何数字，则返回 0。
Cdbl	Cdbl (...)	转换为双精度值
CInt	CInt (...)	转换为整数
Cdate	CDate ("October 19, 1962")	转换为日期。
Str	Str (NUMBER)	返回数字的字符串表示形式。
Day	Day (DATETIME)	返回表示月中日期的 1 到 31 的整数值。
Hour	Hour (DATETIME)	返回表示一天中小时的从 0 到 23 的整数值。

表 8 转换、日期 / 时间

名称	语法	说明
Month	Month (DATETIME)	返回表示年中月份的从 1 到 12 的整数值。
MonthName	MonthName (MONTH)	返回一个包含指定月份名称的字符串值。MONTH 是月份的数值指派。例如，一月份是 1，二月份是 2，等等。
Now	Now	返回包含当前系统日期和时间的日期值。
Year	Year (DATETIME)	返回表示指定日期中年份部分的从 1 到 9999 的整数值。
Today	Today	返回包含当前系统日期的日期值。

文本

表 9 文本

名称	语法	说明
Chr	Chr (65)	返回与指定的 ANSI 字符代码关联的字符。
InStr	InStr (HAYSTACK, NEEDLE)	返回指明一个字符串 (NEEDLE) 在另一个字符串 (HAYSTACK) 中第一次出现时的起始位置的整数。
InStrRev	InStrRev (HAYSTACK, NEEDLE)	返回一个字符串 (NEEDLE) 在另一个字符串 (HAYSTACK) 中第一次出现时的位置，从字符串的右端开始。
Lcase	Lcase (STRING)	返回转换为小写形式的字符串或字符。
Left	Left (STRING, LENGTH)	返回一个字符串，包含从字符串左端起指定数量的字符。
Len	Len (STRING)	返回包含字符串中字符数的整数。
Right	Right (STRING, LENGTH)	返回一个字符串，包含从字符串右端起指定数量的字符。
Split	Split (STRING, DELIMITER)	返回包含指定数量字符串的从零开始的一维数组。指定分隔符用于创建子字符串。

13 表达式

关于表达式

表 9 文本

名称	语法	说明
LTrim, RTrim, Trim	Trim (STRING)	返回一个字符串，包含没有前空格 (LTrim) 和后空格 (RTrim) 或既没有前空格也没有后空格 (Trim) 的指定字符串的副本。
FormatDateTime	FormatDateTime (DATE, FORMAT)	返回表示指定格式日期 / 时间值的字符串表达式。包含以下几种格式（在没有引用的情况下使用，不区分大小写）： <ul style="list-style-type: none">• GENERALDATE: 显示日期和 / 或时间。如果有日期部分，显示为短日期。如果有时间部分，显示为长时间。如果两个部分都存在，则显示两个部分。• LONGDATE: 使用计算机区域设置中指定的长日期格式显示日期。• SHORTDATE: 使用计算机区域设置中指定的短日期格式显示日期。• LONGTIME: 使用计算机区域设置中指定的时间格式显示时间。• SHORTTIME: 使用 24 小时格式 (hh:mm) 显示时间。
FormatNumber	FormatNumber (DATE, DIGITSAFTERDECIMAL, LEADINGDIGIT, PARENS, GROUP)	返回格式设置为数字的表达式。可以使用以下参数，或对默认设置使用空白： <ul style="list-style-type: none">• DIGITSAFTERDECIMAL: 数值，指示小数右侧显示的位数。默认值: -1, 使用计算机的区域设置。• LEADINGDIGIT: True 或 False, 指示分式值是否显示前导 0。默认使用计算机的区域设置。• PARENS: True 或 False, 指示是否在括号内放置负值。默认使用计算机的区域设置。• GROUP: True 或 False, 指示是否使用区域设置中指定的组分隔符分组数字。默认使用计算机的区域设置。

表 9 文本

名称	语法	说明
FormatPercent	FormatPercent (NUMBER)	返回格式设置为百分比（即，乘以 100）后加结尾符号 % 的表达式。
Mid	Mid (STRING, START, LENGTH)	从字符串中返回包含指定数量字符的字符串。START 定义要返回的字符的起始位置。
Ucase	UCase (STRING)	返回包含转换为大写形式的指定字符串的字符串或字符。

其他

表 10 其他

名称	语法	说明
RowNumber	RowNumber (SCOPE) 或 RowNumber (SCOPE, COUNTGROUP)	返回指定范围内所有行的运行计数。范围可以赋予单个字符串 (Scope as String) 或与组号结合 (Scope as String、CountGroup as String)。

格式代码

格式代码用来定义数值或日期 / 时间值的输出格式。您可以从给定的下拉列表中选择预定义的“格式代码”，也可以在“表达式编辑器”中输入自己的“格式代码”。

注意

格式代码不能以等号 (=) 开头！

可以使用以下占位符：

格式代码	说明
0	零占位符。该数字始终显示，即使它是 0。
#	数字占位符。该数字仅在非 0 情况下显示。
.	小数点根据具体的国家 / 地区设置来定义。
,	千位分隔符。如需要，显示千位分隔符，取决于国家 / 地区设置。
F1	显示数字时小数点后保留 1 位数，千位分隔符根据国家 / 地区设置的定义来使用。
F2	显示数字时小数点后保留 2 位数，千位分隔符根据国家 / 地区设置的定义来使用。
F3	显示数字时小数点后保留 3 位数，千位分隔符根据国家 / 地区设置的定义来使用。
d	月中日期 (1—31)。
dd	月中日期 (01—31)。
h	小时 (1—12)
hh	小时 (01—12)
H	小时 (1—24)
HH	小时 (01—24)
m	分钟 (1—59)
mm	分钟 (01—59)

格式代码	说明
M	月份 (1—12)
MM	月份 (01—12)
MMM	月份缩写
ss	秒 (01—59)
tt	AM/PM (上午 / 下午) 标志符
YY	年份 (00—99)

下表显示了格式代码如何定义输出格式的一些示例。

表 11 格式代码 - 示例

值	格式字符串	输出
0.123	#.##	.12
	0.##	0.12
	0.####	0.123
	0.0000	0.1230
	F1	0.1
	F2	0.12
2/27/2007 5:11:30 PM	HH:mm:ss	17:11:30
2/27/2007 5:11:30 PM	dd/MM/YY	02/27/07
2/27/2007 5:11:30 PM	h tt	5 PM

有关格式代码的更多信息，请参阅 MSDN 库 ([http://msdn.microsoft.com/en-us/library/26etazsy\(v=VS.100\).aspx](http://msdn.microsoft.com/en-us/library/26etazsy(v=VS.100).aspx))。

使用表达式

使用变化的表示法筛选数据（大小写敏感）

在使用将数据字段的内容与另一值进行比较的表达式时（如筛选表数据），请注意数据库内容可能会同时包含大写和小写的内容。表示法可能会有不同，尤其是在用户为准备测量而提供条目时，例如样品名或序列名。为确保所有相关记录都能予以考虑，请在比较前先将数据库内容转换为标准的表示法。

表 12 转换数据字段表示法的函数

函数	语法	说明
LCase	=LCase(fieldname)	将所给字段中的所有字符转换为小写。
UCase	=UCase(fieldname)	将所给字段中的所有字符转换为大写。

“筛选”页中的完整条目如下所示：

表 13 完整条目

表达式	运算	值
=UCase(“样品名称”)	=	“TRAMADOL”

筛选空字段

有时候，您可能希望知道数据字段中是包含值还是空的。例如，您希望只显示不为空的字段。空字段不总是真正为空的；有时候它会包含某种空值信息。因此，建议您使用一种特殊的语法来筛选具有实际内容的字段。

要排除空字符串，请使用下列表达式：

表 14 排除空字符串的表达式

表达式	运算	值
<code>=Len(fieldname)</code>	<code>></code>	<code>0</code>

要排除空数值，请使用下列表达式之一：

表达式	运算	值
<code>=fieldname >= 0</code>	<code>=</code>	<code>True</code>
<code>=Len(fieldname)</code>	<code>></code>	<code>0</code>

对具有特定前缀的样品名称重复

您不仅可以根据特定的数据字段来重复复合组，还可以根据自定义表达式重复复合组。例如，您可以使用表达式来根据样品名开头的部分重复复合组。我们假设序列中包含以下的样品：

- Sample1_a
- Sample1_b
- Sample1_c
- Sample2_a
- Sample2_b
- Sample2_c

现在，我们假设您只要将复合组重复两次，也就是对 Sample1 和 Sample2 进行重复。因此，表达式的第一部分必须调用 `Split` 函数，使用下划线作为分隔符将样品名拆分为两个部分：

```
=Split(Sample_Name, "_")
```

13 表达式

使用表达式

此函数的结果是包含下列子条目的列表：

- Sample1; a
- Sample1; b
- Sample1; c
- Sample2; a
- Sample2; b
- Sample2; c

表达式的下一个部分必须为 **Choose** 函数，它始终返回列表中的第一个元素：

```
Choose(1, [list] )
```

本例中的列表是由 **Split** 函数返回的：

```
=Choose(1, Split(Sample_Name, "_"))
```

此表达式返回下列结果：

- Sample1
- Sample1
- Sample1
- Sample2
- Sample2
- Sample2

如果使用该表达式重复复合组，您将只会得到两个复合组，因为这里只有两个不同的值。

使用 **lif** 函数比较数字

例如，您可以使用 **lif** 函数将数值与固定的限值进行比较，返回值本身或一条错误消息。我们假设您要检查化合物量是否低于 0.05 $\mu\text{g}/\text{ml}$ 。含量低于该值时，应显示实际的含量；高于该值时，则应显示消息“过高”。

lif 函数的一般语法为：

```
=lif(条件, then-value, else-value)
```

在本例中，完整的表达式将是：

```
=Iif(Compound_Amount < 0.05, Compound_Amount, " 过高 ")
```

含量的单位不包含在表达式中。该单位在色谱数据系统中定义，并存储在单独的数据字段中。

显示进样类型

在由 Agilent ChemStation 作为源系统生成的分析数据中，字段“Injection_Volume”可能包含正数值或负数值：

- 正数值代表实际进样的样品体积。
- 负数值代表几种特殊的进样操作。会用到以下值：
 - -1: 无进样
 - -2: 手动进样
 - -3: 进样器程序
 - -4: 外部进样器

要显示实际进样的体积或相应的说明，可以使用下列表达式：

```
=Iif(Injection_Volume >= 0, CStr(Round(Injection_Volume, 4)) & " " & Injection_VolumeUnit, choose( Int(Abs(Injection_Volume)), " 无进样 ", " 手动进样 ", " 进样器程序 ", " 外部进样器 "))
```

如果原始值是正数，则会仅舍入到四位小数。如果是负数，则会应用 `Int`、`Abs` 和 `Choose` 函数。

`Abs` 函数将负号删除。因此，负数将转换为正数，而正数则保持不变。

`Int` 函数将双精度浮点数转换为整数值。它返回小数点前面的数字（通过截断而不是舍入获得）。

`Choose` 函数从参数列表中选择并返回一个值。第一个参数为指示相关值的一个数字。在上面的示例中，如果 `Choose` 函数的第一个参数为 1，则该函数返回“无进样”。

筛选日期和时间

筛选日期或日期范围时，您必须将日期放在“#”符号之间：

表 15 筛选日期

表达式	运算	值
=Injection_AcquiredDate	>=	#01/25/2007#

如果不提供日期的特定时间，则系统会将时间假定为 #0:00:00#。因此，为了筛选一个整天，您必须筛选某个日期范围（如下所示）。

表 16 筛选日期（一天）

表达式	运算	值
=Injection_AcquiredDate	>=	#01/25/2007#
=Injection_AcquiredDate	<	#01/26/2007#

如果不使用日期，则不可能筛选某个时间。

利用自定义字段计算

您可在另一个表达式中使用自定义字段的值，正如可以使用任何数据字段的任何值一样。但是，如果仅仅引用字段名称，则会显示自定义字段的无格式内容，该内容包含一个标签、一个分隔符和一个值。如果您创建要在其中仅引用该值的表达式，则需要使用的表达式应与默认情况下在自定义字段值中提供的表达式相同。

为了利用内容计算，您必须首先使用 Val 函数将内容转换为一个数字。

以下示例显示一个包含标签 `TabletWeight` 和值 1020 的样品自定义字段的计算结果。

表 17 引用自定义字段的表达式

表达式	结果
=Sample_CustomField01	TabletWeight 1020
=Trim(Choose(1, Split(Sample_CustomField01, " ")))	TabletWeight
=Trim(Choose(2, Split(Sample_CustomField01, " ")))	1020
=Val(Trim(Choose(2, Split(Sample_CustomField01, " ")))) * 2	2040

相对标准偏差

任何单个函数均不会返回相对标准偏差的值。如果需要显示该值，则必须使用以下表达式来计算该值：

$$=(\text{StDev}(\text{字段名称})/\text{Avg}(\text{字段名称})*100)$$

筛选类似名称

如果序列中拥有不同的样品，且这些样品名称仅在一个数字上存在差异（例如“样品 1”、“样品 2”、“样品 3”等），则可以将“包含”操作符与通配符结合使用来筛选这些类似的样品名称：

表达式	运算	值
=Sample_Name	包含	"* 样品 *"

此过滤器会返回其名称中包含“样品”的所有样品。

以下通配符可用：

- ? 匹配任意单个字符。
- * 匹配任意数量的相邻字符。

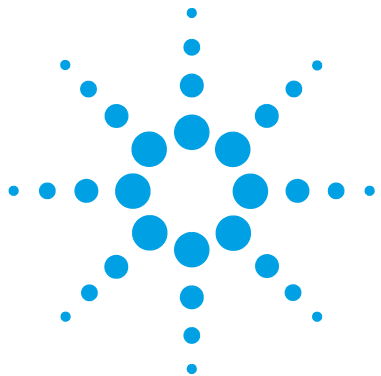
仅显示部分值

根据数据字段的值，您可能希望仅显示部分值。

例如，数据字段 “Sample_DilutionFactor” 和 “Sample_Multipliers” 显示五个用分号隔开的数字，但色谱数据系统仅设置了其中几个数字。因此，如果仅设置第一个数字，则值可能如下所示：10; 0; 0; 0; 0。要仅显示数字 10 而非整个字符串，您可以使用下列表达式：

```
=Choose(1, Split(Sample_Multipliers, ";"))
```

- **Split** 函数会使用分号作为分隔符将字符串拆分为多个部分。在本示例中，各部分为单个数字。
- **Choose** 函数从值列表中选择并返回一个特定值。在本示例中，该函数将返回第一个值，即数字 10。



14 计算变量

关于变量	118
“变量”	119
聚合器	119
类别聚合器	120
自定义提取程序	121
使用变量	123
激活变量的使用	123
基于汇总计算创建变量	123
使用变量	124
重命名变量	125
使用带有唯一键的变量	125
使用“聚合器”	126
使用“类别聚合器”	128
基于某个条件创建聚合器	129
使用自定义提取程序	129
找到复杂自定义字段的可用键	130

本章描述 RTE 中计算变量的特性和用法。



关于变量

通过计算变量，可以创建大量自定义的报告。使用计算变量可以在特定名称下存储特定值或表达式结果并重用同一模板中其他报告项目中的值。

可以在这些不同的方案中使用计算变量。根据方案的不同，计算变量被称为“变量”、“聚合器”、“类别聚合器”或“自定义提取程序”：

- 使用“变量”，可以存储任何单个的数值。
- 使用“聚合器”，可以存储单个值的集合。
- 使用“类别聚合器”，可以存储集合的集合。
- 使用“自定义提取程序”，可以存储复杂自定义字段（例如，“Injection_DiagnosticData”或“Sample_CustomFields”）的 XML 内容中包含的键 / 值对。

要创建新的计算变量，可以使用表的“汇总计算”功能，或创建字段 / 表 / 矩阵值适用的表达式并在“表达式编辑器”中使用“将表达式结果另存为...”功能。

定义变量后，可以在所有的后续报告项目中引用。无法在定义变量之前的报告项目中引用计算变量。

可以看到可用于“变量”节点下“表达式编辑器”中当前项目的所有计算变量的列表。可以在“报告属性”对话框中找到整个报告模板使用的所有计算变量的列表。

“报告属性”对话框还可用于重命名现有的计算变量。重命名包括定义和使用计算变量的所有表达式。

有关计算变量类型的详细信息，请参见以下主题。

“变量”

使用“变量”，可以存储任何单个的数值。该值由唯一名称标识。可以仅提供变量的静态名称，也可以使用动态生成的键（例如，样品名称）。

示例

变量 AvgRetTime 可能包含特定样品中特定化合物的平均保留时间。

使用“唯一键值”的示例

变量 AvgRetTime (Sample_Name) 可以按顺序每个示例创建一次。通过 AvgRetTime("SSRSD1")，可以在 SSRSD1 示例中显示平均保留时间。如果变量嵌入到示例名称重复的复合组中，可以自动列出每个示例的平均保留时间。

聚合器

使用“聚合器”，可以存储单个值的集合。整个集合由唯一名称标识。可以对集合应用多个聚合函数。不允许从集合中选择一个值。

“聚合器”提供以下函数：

- Sum()
该函数返回集合中当前包含的所有值的总和。
- Avg()
该函数返回集合中当前包含的所有值的平均值。
- Stdev()
该函数返回集合中当前包含的所有值的标准偏差。
- Prsd()
该函数返回集合中当前包含的所有值的相对标准偏差 (Stdev/Avg*100)。
- Min()
该函数返回集合中当前包含的最低值。
- Max()
该函数返回集合中当前包含的最高值。
- Count()

该函数返回集合中的元素数量。

- `Clear()`

该函数从集合中删除所有值。同时，还返回删除值的数量。

示例

聚合器 `RetTimeSSRSD1` 可以包含 `SSRSD1` 示例的不同进样中化合物的所有保留时间。可以通过 `Avg(RetTimeSSRSD1)` 返回平均保留时间，或通过 `StDev(RetTimeSSRSD1)` 返回标准偏差。

示例

聚合器 `AvgRetTimes` 可以包含不同样品中相同化合物的平均保留时间。可以通过 `StDev(AvgRetTimes)` 返回标准偏差的平均值。

类别聚合器

使用“类别聚合器”，可以存储集合的集合。整个集合由唯一名称标识。可以对每个包含的集合应用多个聚合函数。不允许从特定集合中选择一个值。

类别聚合器提供以下函数（每个函数只考虑属于给定数据字段的当前活动值的那些值）：

- `Sum([Field])`

该函数返回集合中当前包含的所有值的总和。

- `Avg([Field])`

该函数返回集合中当前包含的所有值的平均值。

- `Stdev([Field])`

该函数返回集合中当前包含的所有值的标准偏差。

- `Prsd([Field])`

该函数返回集合中当前包含的所有值的相对标准偏差 ($Stdev/Avg*100$)。

- `Min([Field])`

该函数返回集合中当前包含的最低值。

- `Max([Field])`

该函数返回集合中当前包含的最高值。

- `Count([Field])`

该函数返回集合中的元素数量。

- `Clear([Field])`

该函数从集合中删除所有值。同时，还返回删除值的数量。

示例

某样品已进样多次。某特定化合物在每次进样中都检测到。对于每个样品，创建保留时间的集合。这些集合通过样品名称处理。所有这些集合包含在名为 `CatRetentionTimes` 的类别聚合器中。

您可以通过 `Avg(CatRetentionTimes(Sample_Name))` 返回每个样品的平均保留时间。括号中的参数定义特定类别，即，应用 `Avg` 函数的 `CatRetentionTimes` 中包含的值的部分。

例如，可以在样品名称重复的复合组中使用该表达式。然后自动计算并显示每个样品名称的平均保留时间。

自定义提取程序

有一些特定数据字段不包含单个值但包含整个 XML 结构。该 XML 结构包含各种键 / 值对，其中确切键和值取决于色谱数据系统及其配置（请参见第 162 页的“诊断数据中的关键字”）。通过“自定义提取程序”，可以存储该 XML 结构。可以应用多个函数以访问单个值。

“自定义提取程序”提供以下函数：

- `GetValue(name)`

该函数返回给定名称下存储的值。

- `GetNameValue(index)`

该函数返回 `Key=Value` 格式的键和值的组合。通过 `index=0`，函数返回第一个键 / 值对。

- `GetValueByIndex(index)`

该函数在给定位置返回名称 / 值对的值。第一个键 / 值对由 0 索引。

- `Count()`

该函数返回 XML 结构的键 / 值对数。

14 计算变量

关于变量

- `Clear()`

该函数从自定义提取程序删除 XML 结构并返回数字 0。

示例


您可以向具有值 “=Injection_DiagnosticData” 的模板添加不可见文本字段。如果将该值另存为名为 `CustDiagnosticData` 的“自定义提取器”，随后可以通过表达式访问 ChemStation LC 测量的开始压力：

```
=CustDiagnosticData(GetValue("StartPressure")).
```

使用变量


激活变量的使用

只有计算变量在针对报告模板的情况下被激活，才能使用计算变量。

- 1 单击  打开报告属性。
- 2 在“报告属性”中，选择“计算变量”页。
- 3 选中“在表达式中使用计算变量”复选框。
- 4 保存设置。

基于汇总计算创建变量


在本示例中，您将为每种化合物创建一个表。每个表均会显示每种样品中化合物的保留时间。第二列会显示整个序列中化合物平均保留时间的差异。为此，您将创建一个复合组，其中包含一个隐藏表和一个可见表。隐藏表用于存储变量中的平均值。

- 1 确保已在报告模板中激活变量（请参见第 123 页的“激活变量的使用”）。
- 2 将数据字段“字段” > “化合物” > “名称”添加到模板中。
- 3 将两个“化合物汇总”表添加到模板中。
- 4 选择所有三个项目，然后单击  以创建复合组。
- 5 在“化合物名称”上重复该复合组。
- 6 如果需要，请筛选主信号的复合组（Peak_Calibrole=1）。
- 7 准备用于存储变量的第一个表。
 - a 从表中删除“重复打开”设置。
 - b 在“高级”页中，清除“可见”复选框。
 - c 在“列”页上，选择“保留时间”列，并单击“列属性”。
 - d 在“汇总计算”页上，选择“Average”函数，然后输入 VarAvgRT 作为“变量名称”。

- e 确认所有设置。
 - f 在“编辑窗格”中，调整表的大小，以便其仅需要最小空间。
- 8 准备用于显示保留时间和平均保留时间之间差异的第二个表。
- a 从表中删除“重复打开”设置。
 - b 在“列”页上，将一个“自定义字段”添加到表格布局中。
 - c 将新列移至“保留时间”列的右侧，并调整其大小。
 - d 在新列的“列属性”中，输入以下表达式作为值： $\text{=Peak_RetentionTime} - \text{VarAvgRT}$
 - e 在“格式”页上，将新列的数字格式调整为“数字”“1234.00”，然后将“舍入”设置为 4 个小数位。
 - f 确认所有设置并生成预览。
- 所生成的报告将显示单个保留时间与序列平均之间的差异。

使用变量

创建变量：

- 1 确保已在报告模板中激活变量（请参见第 123 页的“激活变量的使用”）。
- 2 将两个文本字段或数据字段添加到模板中。
- 3 选择这两个字段并单击  以创建一个复合组。
- 4 在“样品名称”上重复该复合组。
- 5 输入一个自定义表达式作为其中一个字段的值，例如样品量的校正因子： $\text{=Sample_Amount} * 99$
- 6 单击“将表达式结果另存为...”
“将表达式结果另存为”对话框随即打开。
- 7 确保已选中“变量”选项，然后输入“计算变量名称”，例如 $\text{VarAmountCorrected}$ 。

注意


变量名称中不允许使用特殊字符。

8 保存设置。

要使用后续报告项目中的变量：

- 1 调整复合组的大小，从而为新报告项目提供空间。
- 2 将包含化合物信息的一个表添加到复合组中，例如“化合物结果”表。
- 3 将新列添加到该表中。输入一个自定义表达式作为新列的值，例如化合物量乘以已更正样品量： $=\text{Compound_Amount} * \text{VarAmountCorrected}$

重命名变量

- 1 单击  打开报告属性。
- 2 在“报告属性”中，选择“计算变量”页。
- 3 选择要重命名的变量。
- 4 单击“重命名”。

“重命名计算变量”对话框随即打开。


- 5 输入变量的新名称。
- 6 保存设置。

现在已在使用该变量的所有表达式中和整个报告模板中，对该变量进行了重命名。

使用带有唯一键的变量

以下示例介绍如何创建将每个样品中化合物的保留时间与平均保留时间相比较的表。

准备变量：

- 1 确保已在报告模板中激活变量（请参见第 123 页的“激活变量的使用”）
- 2 将两个文本字段添加到模板中。
- 3 选择这两个文本字段并单击  以创建一个复合组。
- 4 在“化合物名称”上重复该复合组。

14 计算变量 使用变量

- 5 在第一个文本字段中，输入静态文本。例如 RT Average。
- 6 在第二个字段中，输入平均保留时间的表达式：=Avg(Peak_RetentionTime)
- 7 将第二个字段的表达式另存为一个变量。使用以下设置：
 - “计算变量”：“变量”
 - “计算变量名称”：例如 VarRTAverage
 - “唯一键值”：=Compound_Name

注意

在“唯一键值”设置中，您使用的值必须与进行复合组重复所用的值相同

使用变量：

- 1 在复合组下，创建一个“化合物汇总”表。
- 2 利用以下表达式添加表列：=Peak_RetentionTime - VarRTAverage(Compound_Name)

使用“聚合器”

此示例介绍如何比较两组不同样品（例如校正样品和检验样品，或其名称包含 SampleA 的样品和其名称包含 SampleB 的样品）平均峰面积。

准备变量：

- 1 两次将“化合物结果”表添加到模板中。
- 2 根据要为其获取平均峰面积的样品筛选表。

表 18 筛选样品类型

表达式	运算	值	说明
Sample_Type	=	1	第一个表仅包含校正样品。
Sample_Type	=	2	第二个表仅包含检验样品。

- 3 在每个表中：打开“面积”列的“列属性”对话框，然后将值另存为变量。使用以下设置：
 - “计算变量”：“聚合器”
 - “计算变量名称”：例如，第一个表中的 AreaAggregator1 和第二个表中的 AreaAggregator2。
 - “类别”：“[无]”
 - “条件”：“[无]”

使用变量：

- 1 在这两个表下，利用以下表达式创建文本字段：`=Avg(AreaAggregator1) - Avg(AreaAggregator2)`

您也可以将 Sum、Stdev、Prsd、Min、Max 或 Count 函数（而不是 Avg 函数）应用到“聚合器”变量中。

注意

Clear 函数

如果在复合组内创建和使用“聚合器”，请在组的末尾使用 Clear 函数。利用以下表达式添加两个隐藏的文本字段：

```
=Clear(AreaAggregator1)
```

```
=Clear(AreaAggregator2)
```

这样就会清除“聚合器”的所有内容，从而确保相应的值不与后续的组重复相混合。

使用“类别聚合器”

此示例介绍如何比较两组不同样品的平均峰面积。与其他示例（请参见第 126 页的“使用“聚合器””）相比，此时会准备信息并针对每种化合物分别显示。

创建变量：

- 1 两次将“化合物结果”表添加到模板中。
- 2 在“化合物名称”上同时重复两个表。
- 3 根据要为其获取平均峰面积的样品筛选表。
- 4 在每个表中：打开“面积”列的“列属性”对话框，然后将值另存为变量。
使用以下设置：
 - “计算变量”：“聚合器”
 - “计算变量名称”：例如，第一个表中的 AreaAggregator1 和第二个表中的 AreaAggregator2。
 - “类别”：“化合物名称”
 - “条件”：“[无]”

注意

对于“类别”设置，您使用的值必须与表的“重复打开”设置中的值相同。

使用变量：

- 1 在表下，将两个文本字段添加到模板中：
 - 第一个文本字段显示某些静态文本和化合物名称：
`= "Difference between average areas for" + Compound_Name`
 - 第二个文本字段显示计算得出的值：
`= Avg (AreaAggregator1 (Compound_Name)) -
Avg (AreaAggregator2 (Compound_Name))`
- 2 选择这两个字段并创建一个复合组。
- 3 在“化合物名称”上重复该复合组。
在很多表之后，生成的模板将显示每个化合物的文本字段。

基于某个条件创建聚合器

此示例介绍如何仅计算大于特定值的峰面积之和。为了计算每个化合物的面积之和，使用了在“化合物名称”上重复的复合组。

- 1 将“化合物结果”表添加到模板中。
- 2 打开“面积”列的“列属性”对话框，然后将值另存为变量。
 - a 在“计算变量”下，选择“聚合器”。
 - b 在“计算变量名称”下，输入名称。例如 `Arealf`。
 - c 在“条件”下，双击“表达式...”。
 - d 在“表达式编辑器”中，输入以下表达式：`=Peak_Area > 3`
 - e 保存设置。
- 3 在表下，添加显示满足条件的所有面积之和的文本字段。使用以下条件：`=Sum(Arealf)`
- 4 添加包含 `Clear` 函数的另一个文本字段：`=Clear(Arealf)`
- 5 利用 `Clear` 函数清除该文本字段的“可见性”复选框。
- 6 选择表以及两个文本字段，然后创建复合组。
- 7 在“化合物名称”上重复该复合组。

对于每个化合物，生成的模板将显示包含所有进样的模板以及包含峰面积之和的文本框。此和基于大于 3 的所有峰面积。

使用自定义提取程序

以下示例介绍如何访问由 ChemStation 系统提供的诊断数据。

创建自定义提取器：

- 1 将文本字段添加到模板中。
- 2 输入表达式 “`=Injection_DiagnosticData`” 作为值。
- 3 在“表达式编辑器”中，单击“将表达式结果另存为...”。

“将表达式结果另存为”对话框随即打开。
- 4 确保已选中“自定义提取程序”选项，然后输入“计算自定义提取程序名称”，例如 `MyDiagnosticData`。

注意

变量名称中不允许使用特殊字符。

- 5 保存设置。
- 6 将文本字段设置为不可见。

使用自定义提取器

- 1 将文本字段添加到模板中，并将其置于以前创建的文本字段之下。
- 2 输入以下表达式，以访问某个进样的开始压力：
`=MyDiagnosticData(GetValue("StartPressure"))`。也可以选择下面的面板中“表达式编辑器”内的变量和函数。

注意

在本示例中，您将利用键 `StartPressure` 来访问开始压力。有关其他可用键的信息，请参见第 162 页的“诊断数据中的关键字”或第 130 页的“找到复杂自定义字段的可用键”。

找到复杂自定义字段的可用键

如果不确定在复杂自定义字段中哪些键可用，则可以使用以下步骤来查看整个 XML 结构。这些键作为 `CustomField` 标识的 `Name` 属性提供。

- 1 将复杂自定义字段（例如“进样”类别中的字段“诊断数据”）添加到模板中。
“自定义提取程序信息”对话框随即打开，并提示您输入键名称。
- 2 将输入字段保留为空，并单击“取消”。
RTE 会将字段添加到模版中。标签会显示字段的名称（例如“`Injection_DiagnosticData`”），而值会显示 XML 内容。
- 3 将字段的宽度调整为模板宽度。
- 4 生成报告预览，以查看完整的 XML 内容。
- 5 查找 `Name` 属性。这些属性的值为您可用于此复杂自定义字段的键。
例如：`Name= "StartPressure`

概念指南



15 报告模板审计跟踪

关于报告模板审计跟踪 132



关于报告模板审计跟踪

报告模板审计跟踪会详细列出对模板所做的全部修改。列表中包括以下信息：

- “模板版本”：每次保存模板后，模板版本都会递增一个版本号。
- “用户名”：修改模板的用户的名称。该名称由操作系统提供。
- “机器名称”：在其上修改模板的 PC 的名称。
- “日期时间”：保存模板版本时的日期和时间。
- “审计条目”：对修改的说明。

保存报告模板时修改即写入到报告模板审计跟踪。因此，报告模板审计跟踪显示的是截止到上次保存日期时的所有更改。



16 报告参数

关于报告参数	134
使用报告参数	135
创建单个报告参数	135
创建多值报告参数	136
利用报告参数计算	137
筛选一个多值报告参数	138



关于报告参数

通过使用报告参数，您可以让报告模板变得更有动态。主要有两种基本的参数类型：

- **交互式报告参数（缺省条件下）：**

在报告生成前，每次您都需要提供这些参数。在报告预览区域的顶部将显示一个额外的报告参数窗格，您可以在此处输入所需值。单击“查看报告”后，将生成使用给定参数的报告。

Report Parameters

Start Date: 01.01.2011 End Date: 31.12.2011 View Report

Dezember 2011

Mo	Di	Mi	Do	Fr	Sa	So
28	29	30	1	2	3	4
5	6	7	8	9	10	11
12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25
26	27	28	29	30	31	1
2	3	4	5	6	7	8

Heute: 04.11.2011

图 17 报告参数示例

例如，交互式参数可以是：

- 开始日期
- 结束日期
- 年
- 化合物名称
- **内部报告参数：**

这些参数在报告预览中没有输入字段。在开发模板时，您已将这些参数设为固定值。因此，您可以在整个模板的任意表达式中使用该值。报告将使用给定值自动生成。


内部参数的示例包括：

- 在多个表达式中使用的校正因子
- 在条件格式中使用的数量值

使用报告参数

创建单个报告参数

此过程说明如何创建仅含一个值的简单报告参数。

- 1 单击  打开报告属性。
- 2 在“报告属性”中，选择“报告参数”页。
- 3 单击“添加”。

将创建一个新的参数，并将其添加到列表中。

- 4 调整参数名称。例如，输入校正因子。
- 5 调整数据类型。例如，选择“整数”
- 6 在“提示名称”字段中，为报告参数提供一个标签。例如，输入校正因子：。

该文本将显示在预览渔区顶部的报告参数窗格中，用户在此处提供报告参数所需的值。

- 7 如果需要，请选中“内部”复选框。

- 要创建一个交互式报告参数，请执行以下操作：确保复选框已清除。

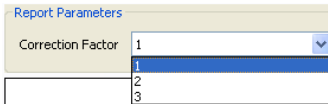
预览报告时，您只有提供一个值后才能生成报告。

- 要创建一个内部报告参数，请执行以下操作：选中复选框。

对于内部报告参数，在报告预览中将不显示输入字段。报告将使用缺省值自动生成。

- 8 可选：在“可用值”下提供数个标签和值。为简便起见，为“标签”和“值”使用相同条目。

如果您提供了数个可用值，其标签将以一个下拉列表显示，可在其中选择一个值。



Report Parameters	
Correction Factor	1
	1
	2
	3

16 报告参数

使用报告参数

- 9 为报告参数提供一个缺省值。

对于交互式参数，缺省参数将会以推荐值的形式显示在报告预览中。对于内部报告参数以及在自动序列运行的同时使用模板的情况，系统将会自动访问该缺省值。

创建多值报告参数

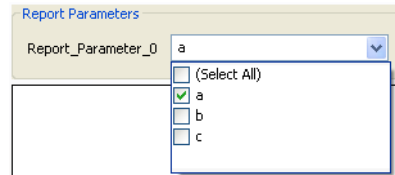
- 1 创建一个新的报告参数，并提供“参数名称”、“数据类型”和“提示名称”信息。

- 2 在“可用值”下，输入您希望提供给用户的值。

这些标签将显示在用户界面中，而当在您使用报告参数进行计算时，这些值将被报告使用。

- 3 选中“多值”复选框。

可用值将以复选框列表的形式显示在报告预览中。



- 4 输入一个或多个缺省值。

缺省值必须和可用值中的其中一个相对应。您可以提供多个缺省值。在这种情况下，将默认选中多个复选框。

利用报告参数计算

单值报告参数

例如，您的报告包含一个峰结果表。您希望能够用校正因子乘以结果。

在“报告参数”对话框中，创建一个报告参数，名称为校正因子，数据类型为“整数”，缺省值为 1。

在表格，在“值”字段为列输入如下表达式：

`=Compound_Amount * CorrectionFactor`

只要清除了“多值”复选框，该语法一直有效。即使您在“可用值”下输入了数个值，用户也仅能选择其中一个，而且表达式是明确的。

多值报告参数

如果您选中了“多值”复选框，所有选定值将存储在一个集合中。因此您必须为参数名称添加一个索引，以便指示一个具体值。

- `=Report_Parameter(0)` 指的是第一个选定值
- `=Report_Parameter(1)` 指的是第二个选定值
- ... 等

筛选一个多值报告参数

如果使用的是多值报告参数，可能需要同时筛选多个数值。例如，您创建了样品类型报告参数 `STypes`，并提供了下列可用值：

标签	值
校正	1
样品	3
控制	4

如果用户选择了多个值，而您想要显示所有已选值的表格。要达到这个效果，可使用下列表格筛选表达式：

表达式	运算	值
<code>=Join(STypes, " ").Contains(样品_类型)</code>	<code>=</code>	<code>true</code>

`Join` 函数会返回一个通过连接阵列元素创建的字符串。在本例中，阵列为多值报告参数 `STypes`。`Join` 函数的第二个参数（本例中是一个空格 " "）是创建字符串时所用的分隔符。

如果之前的字符串中包含 `Contains` 函数中作为参数的字符，那么 `Contains` 函数将返回 `True`。

概念指南



17 文档结构图

关于文档结构图	140
使用文档结构图	142



关于文档结构图

文档结构图为您在报告预览中提供了一个书签列表。通过这些书签，您可以轻松地跳至包含相应信息的报告页面。例如，报告包含一个含有 20 个样品的序列。每个样品都已进样数次，每次进样对应一个结果表。通过文档结构图中的书签，您可以直接跳至每个特定的进样。

Sequence Summary Report

Standard 1

[008-0101.D](#)
008-0102.D
008-1401.D
008-1402.D

Standard 2
Standard 3
Sample 1
Sample 2
Sample 3
Sample 4
Sample 5
Sample 6
Sample 7
Sample 8
Sample 9
Sample 10
Sample 11
Sample 12
Sample 13
Sample 14
Sample 15
Sample 16
Sample 17
Sample 18
Sample 19
Sample 20

Sample name: Standard 1

Injection data file: 008-0101.D **Acquisition date:**

Name	RT [min]	Area
Uracil	1.354	30.4511
Ethyl paraben	5.007	53.2767
Propyl paraben	5.851	48.548
Heptyl paraben	8.784	59.5623

Injection data file: 008-0102.D **Acquisition date:**

Name	RT [min]	Area
Uracil	1.355	26.4525
Ethyl paraben	4.999	52.9282
Propyl paraben	5.843	48.6188
Heptyl paraben	8.78	59.5815

图 18 使用文档结构图进行报告预览示例




您可以为重复表或矩阵创建书签：通过使用这些报告项目，文档结构图表达式总是和重复表达式保持一致。

此外，您可以为重复复合组内的其他报告项目（如文本字段或数据字段）指定书签。在多数情况下，书签将反映您用于重复复合组的值。但是，您也可以根据自己的需要自定义该表达式。

当您将包含文档结构图的报告导出至 PDF 文件时，书签也将出现在 PDF 文件中。

使用文档结构图

本示例介绍了一个包含数个样品的序列。每个样品已进样多次。文档结构图显示了每次进样的书签。

- 1 创建一个新的“单个序列汇总”模板。
- 2 将如下报告项目添加至您的模板，并以上下顺序放置。
 - a “Sample_Name” 数据字段
 - b “Injection_DataFileName” 数据字段
 - c “化合物结果” 表
- 3 选择“化合物结果”表和“Injection_DataFileName”字段，然后单击  以创建包含这两个项目的复合组。
- 4 在 =Injection_ID 上重复组。
- 5 选择复合组和“Sample_Name”数据字段，然后单击  以创建另一个上级复合组。
- 6 在 =Sample_Name 上重复该上级复合组。
- 7 将“Sample_Name”数据字的文档结构图表达式设置为 =Sample_Name。
- 8 将“Injection_DataFileName”数据字的文档结构图表达式设置为 =Injection_DataFileName。
- 9 在报告预览中，单击加号图标  以扩展文档结构图。

Sequence Summary Report

Standard 1

Injection data file: 008-0101.D **Acquisition date:**

Name	RT [min]	Area
Uracil	1.354	30.4511
Ethyl paraben	5.007	53.2767
Propyl paraben	5.851	48.548
Heptyl paraben	8.784	59.5623

Standard 2

Injection data file: 008-0102.D **Acquisition date:**

Name	RT [min]	Area
Uracil	1.355	26.4525
Ethyl paraben	4.999	52.9282
Propyl paraben	5.843	48.6188
Heptyl paraben	8.78	59.5815

图 19 使用文档结构图进行报告预览示例

17 文档结构图

使用文档结构图



18 锁定 / 解锁的报告项目

关于锁定 / 解锁的报告项目	146
锁定或解锁报告项目	147

关于锁定 / 解锁的报告项目

注意

只有当您在 Agilent OpenLAB 共享服务中拥有“锁定 / 解锁报告项目”权限时，您才可以对项目进行锁定或解锁操作。

您可以锁定单个报告项目，也可以锁定包含多个报告项目的复合组。无法对锁定的项目做任何修改。

锁定的项目可进行的操作：

- 查看属性。
- 将项目移至模板内。

锁定的项目无法进行的操作：

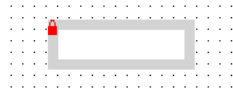
- 修改属性。
- 将项目移出模板。

例如，您可以锁定包含已被验证和批准的复杂计算的复合组。锁定后，可以保证项目不会被意外更改。


锁定或解锁报告项目

1 选择报告项目。


如果项目被锁定，在选择边框的左上角会显示一个小的红色锁定图标。



2 要解锁锁定项目，请执行以下操作：右键单击项目，然后从上下文菜单中选择

“解锁”。另外，您可以单击工具栏上的“解锁报告项目”图标。 

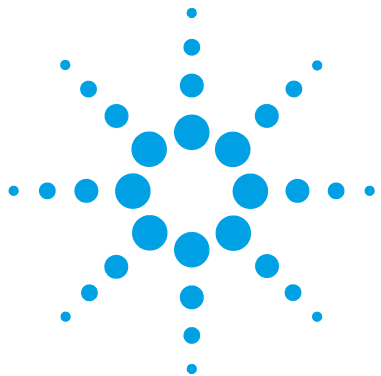
3 要锁定项目，请执行以下操作：右键单击项目，然后从上下文菜单中选择

“锁定”。另外，您可以单击工具栏上的“锁定报告项目”图标。 

注意

“锁定”和“解锁”命令仅当您在 Agilent OpenLAB 共享服务中拥有所需权限时才可用。

18 锁定 / 解锁的报告项目
锁定或解锁报告项目



19 附录

枚举	150
BaselineModel 枚举	150
BracketingMode 枚举	151
BracketingType 枚举	151
CalibPeakRole 枚举	152
CalibrationCurveOrigin 枚举	152
CalibrationCurveType 枚举	153
CompoundQuantitationType 枚举	153
CompoundType 枚举	154
InjectionSource 枚举	154
InjectorPosition 枚举	154
InstrumentTechnique 枚举	155
PackagingMode 枚举	155
PeakType 枚举	155
QuantificationMethod 枚举	157
ResponseFactorCalcMode 枚举	157
ResponseFactorUpdate 枚举	158
RetentionTimeUpdate 枚举	158
RunType 枚举	158
SampleContextIntegrity 枚举	160
SampleContextSource 枚举	160
SampleContextType 枚举	160
SampleType 枚举	161
SeparationMediumPosition 枚举	161
诊断数据中的关键字	162

本章节包含表达式编辑器中可用的所有操作符和函数的列表。



枚举

一些数据字段包含代表某些值的特定数字。这些所谓的枚举通常表示在色谱数据系统的下拉列表中显示的所有数据。

显示枚举

如果在一个数据字段、表列或矩阵列中显示这些数据字段，RTE 将自动选择与存储数字对应的文本值。

筛选枚举

如果希望筛选枚举的特定值，必须在“值”字段中输入正确的数字。在以下部分可以查找文本列表值和所有枚举的相应值。

BaselineModel 枚举

编号	说明
0	未知
1	线性
2	指数
3	ExtendedExponential

BracketingMode 枚举

编号	说明
0	无
1	标准
2	标准清除校正
3	标准重叠
4	整体序列
5	序列反向计算

BracketingType 枚举

编号	说明
0	未定义
1	打开
2	关闭
3	中间

CalibPeakRole 枚举

编号	说明
0	无
1	主要
2	限定符
3	忽略
4	NewMain
5	NewIgnore
6	DetectorMain

CalibrationCurveOrigin 枚举

编号	说明
0	未定义
1	包括
2	强制
3	连接

CalibrationCurveType 枚举

编号	说明
0	未定义
1	线性
2	平方
3	立方
4	指数
5	对数
6	幂
7	平均响应因子
8	分段
9	自定义

CompoundQuantitationType 枚举

编号	说明
0	未定义
1	面积
2	高度
3	计数

CompoundType 枚举

编号	说明
0	未知
1	预期
2	未校正预期
3	峰总和
4	组
5	未识别预期

InjectionSource 枚举

编号	说明
0	未定义
1	标准进样
2	无进样
3	手动进样
4	进样器程序

InjectorPosition 枚举

编号	说明
0	未定义
1	前面
2	后面

InstrumentTechnique 枚举

编号	说明
0	未定义
1	液相色谱法
2	气相色谱法
3	质谱分析
4	毛细管电泳法
5	UVVis
6	微流体

PackagingMode 枚举

编号	说明
0	未定义
1	经典
2	全部结果集
3	带模板的结果集
4	带方法的结果集
5	简单结果集

PeakType 枚举

编号	说明
0	未知
1	正切值

编号	说明
2	溶剂
3	区域总和
4	前肩峰下拉线
5	前肩峰切线
6	手动
7	手动负
8	手动负肩峰下拉线
9	手动负肩峰切线
10	手动肩峰下拉线
11	手动肩峰切线
12	手动切线撤去指数
13	手动切线撤去新指数
14	手动切线撤去常规
15	负
16	负肩峰下拉线
17	负肩峰切线
18	普通峰
19	后肩峰下拉线
20	后肩峰切线
21	重新计算溶剂峰
22	肩峰下拉线
23	肩峰切线
24	切线撤去指数
25	切线撤去新指数
26	切线撤去常规

QuantificationMethod 枚举

名称	说明
0	未定义
1	面积百分比
2	ESTD
3	ESTD%
4	高度百分比
5	ISTD
6	ISTD%
7	Norm%

ResponseFactorCalcMode 枚举

编号	说明
0	未定义
1	每次响应的量
2	每单位量的响应

ResponseFactorUpdate 枚举

编号	说明
0	未定义
1	无更新
2	替换
3	平均值
4	区间循环校正
5	偏差百分比

RetentionTimeUpdate 枚举

编号	说明
0	未定义
1	无更新
2	替换
3	平均值
4	区间循环校正

RunType 枚举

编号	说明
0	未定义
1	清除所有校正
2	清除校正级别
3	打印校正报告

编号	说明
4	平均多次进样结果
5	清除重复进样
6	开始循环
7	结束循环
8	系统关闭
9	打印其他报告
10	开始系统适用性
11	系统适用性标准
12	结束系统适用性
13	开始总结
14	总结运行
15	结束总结
16	样品瓶总结
17	QC 检查标准
18	未加料
19	已加料
20	加料 1/2
21	加料 2/2
22	重复
23	开始校正
24	结束校正
25	基线检查
26	基线文件

SampleContextIntegrity 枚举

编号	说明
0	未定义
1	全部
2	部分

SampleContextSource 枚举

编号	说明
0	未定义
1	获得
2	经过再加工的
3	虚拟

SampleContextType 枚举

编号	说明
0	未定义
1	单个示例
2	序列

SampleType 枚举

编号	说明
0	未指定
1	校正
2	检验
3	样品
4	控件
5	空
6	扶梯
7	系统适用性

SeparationMediumPosition 枚举

编号	说明
0	未知
1	前面
2	左侧
3	后部
4	右侧

诊断数据中的关键字

“进样_诊断数据”字段中的键

“进样_诊断数据”字段中使用的键取决于创建数据的生成器。它们可能包含早期维护反馈 (EMF) 计算器，如检测器灯的使用小时数。

下表显示按照使用的生成器最常见的键。

注意

如果不确定正确的键，请参见第 130 页的“找到复杂自定义字段的可用键”。

ChemStation	ChemStore
DAD1UV 开启时间	不适用
DAD1UV 使用时间	不适用
DAD/Vis 开启时间	不适用
DAD1Vis 使用时间	不适用
起始压力	起始泵压
终止压力	终止泵压
起始流量	起始泵流量
终止流量	终止泵流量
泵类型	不适用
起始左部温度	起始左部温度
终止左部温度	终止左部温度
起始右部温度	起始右部温度
终止右部温度	终止右部温度
空气温度	不适用
进样体积	不适用

ChemStation	ChemStore
实际进样体积	不适用
进样体积字段	不适用
实际进样体积文本	不适用

索引

A

abs 104
avg 103

B

报告模板审计跟踪 132
包含 115
BI Studio 10
表达式 100
表组 39
表 26
Business Intelligence
Development Studio 10

C

cdate 104
cdbi 104
乘积因子 116
chr 105
cint 104
count 103
countDistinct 103
countRows 103
cstr 104

D

打包模式枚举 155
date format 104
date 104
day 104
第二行 32

E

exp 104

F

方法属性 95
方法信息 94
first 103
formatDateTime 105

H

hour 104

I

iif 102
instrev 105
instr 105
int 104

J

进样类型 113
进样体积 113
进样源枚举 154

L

last 103
lcase 105
left 105
like 101
log10 104
log 104
ltrim 105

M

max 103
month 104
monthname 104

N

now 104

P

pow 104

Q

QuantificationMethod 枚
举 157
区域名称 95

R

right 105
round 104
rownumber 105, 107
rtrim 105

S

双行表 32
split 105
sqrt 104
stdevp 103
stdev 103
str 104
sum 103

T

today 104
通配符 61, 115
trim 105

U

ucase 105

V

val 104

X

x 值 89
x 轴 89
x 轴标签 89
稀释因子 116
XML 121

Y

y 轴标签 88
year 104
页脚 35
仪器模块 98
运行类型枚举 158

报

报告类型 12

背

背景色 29

标

标准偏差 103

表

表达式 110, 110
表列 27, 29
表组 41

串

串联 105

大

大写 105, 105, 110, 110

复

复杂自定义字段 121

格

格式代码 108

集

集合函数 103

快

快捷键 13

宽

宽度 13

列

列标题 31

枚

枚举 150

幂

幂 101, 104

平

平方根 104
平均值 103

气

气泡图 81

求

求余 101

日

日期 / 时间格式 108

散

散点图 81

舍

舍入 34

数

数字格式 34, 108

通

通配符 101

图

图表 80
图例标题 90

系

系列标签 90
系列组 87

线

线形图 80

索引

相

相对标准偏差 103

小

小数位数 34

小写 110, 110

信

信号名称 66

选

选择 102

压

压力 66

仪

仪器曲线 66

有

有效位数 34

种

种类组 83

柱

柱形图 80

自

自定义提取程序 121

www.agilent.com

内容提要

本指南包含针对模板开发人员的信息。主要描述了报告模板编辑器 (RTE) 的概念和高级功能。

© Agilent Technologies 2009-2012, 2013

Printed in Germany
01/2013



G4635-97014



Agilent Technologies