

Guía de la función

Software SCIEX OS

Columnas calculadas



Este documento se proporciona a los clientes que han adquirido un equipo SCIEX, para que lo usen durante el funcionamiento de dicho equipo SCIEX. Este documento está protegido por derechos de propiedad y queda estrictamente prohibida cualquier reproducción total o parcial, a menos que SCIEX lo autorice por escrito.

El software que se describe en este documento se proporciona bajo un acuerdo de licencia. Está legalmente prohibida la copia, modificación o distribución del software en cualquier medio, a menos que se permita específicamente en el acuerdo de licencia. Además, es posible que el acuerdo de licencia prohíba igualmente desensamblar, realizar operaciones de ingeniería inversa o descompilar el software con cualquier fin. Las garantías son las indicadas en ese documento.

Algunas partes de este documento pueden hacer referencia a otros fabricantes o sus productos, que pueden contener piezas cuyos nombres se han registrado como marcas comerciales o funcionan como marcas comerciales de sus respectivos propietarios. El uso de dichos nombres en este documento pretende únicamente designar los productos de esos fabricantes suministrados por SCIEX para la incorporación en su equipo y no supone ningún derecho o licencia de uso, ni permite a terceros el empleo de dichos nombres de productos o fabricantes como marcas comerciales.

Las garantías de SCIEX están limitadas a aquellas garantías expresas proporcionadas en el momento de la venta o licencia de sus productos, y son representaciones, garantías y obligaciones únicas y exclusivas de SCIEX. SCIEX no ofrece otras garantías de ningún tipo, expresas o implícitas, incluyendo, entre otras, garantías de comercialización o adecuación para un fin específico, ya se deriven de un estatuto, cualquier tipo de legislación, uso comercial o transcurso de negociación; SCIEX rechaza expresamente todas estas garantías y no asume ninguna responsabilidad, general o accidental, por daños indirectos o derivados del uso por parte del comprador o por cualquier circunstancia adversa derivada de este.

Para uso exclusivo en investigación. No para uso en procedimientos diagnósticos.

Las marcas comerciales o marcas registradas aquí mencionadas, incluidos sus correspondientes logotipos, son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios, en Estados Unidos y algunos otros países (consulte sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ se usa bajo licencia.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Tabla de contenido

1 Descripción general	4
2 Fórmulas	5
Editor de fórmulas.....	5
Aritmética simple.....	7
Funciones más complejas.....	8
Función IF	9
Operadores.....	10
Opción Tratar los valores de texto resultantes como	11
Extracción simple de información no predeterminada.....	12
Ejemplos: fórmulas.....	14
Funciones GET.....	14
Funciones agregadas.....	25
Funciones numéricas.....	27
Funciones de texto.....	30
Función IF	35
3 Búsqueda condicional	41
Editor de búsqueda condicional.....	41
Ejemplos: búsqueda condicional.....	44
A Referencia de fórmulas	54
Contacto	77
Formación del cliente.....	77
Centro de aprendizaje en línea.....	77
Asistencia técnica de SCIEX.....	77
Ciberseguridad.....	77
Documentación.....	77

Descripción general

1

Las columnas calculadas son columnas que se crean mediante una fórmula o una tabla de búsqueda condicional. Las columnas calculadas se crean en un método de procesamiento.

Durante el procesamiento, se aplican las fórmulas y las tablas de búsqueda condicional y los resultados se muestran en columnas personalizadas en la tabla de resultados.

Nota: Si se está usando una columna calculada creada en una versión anterior del software SCIEX OS, revise los resultados para asegurarse de que sean correctos.

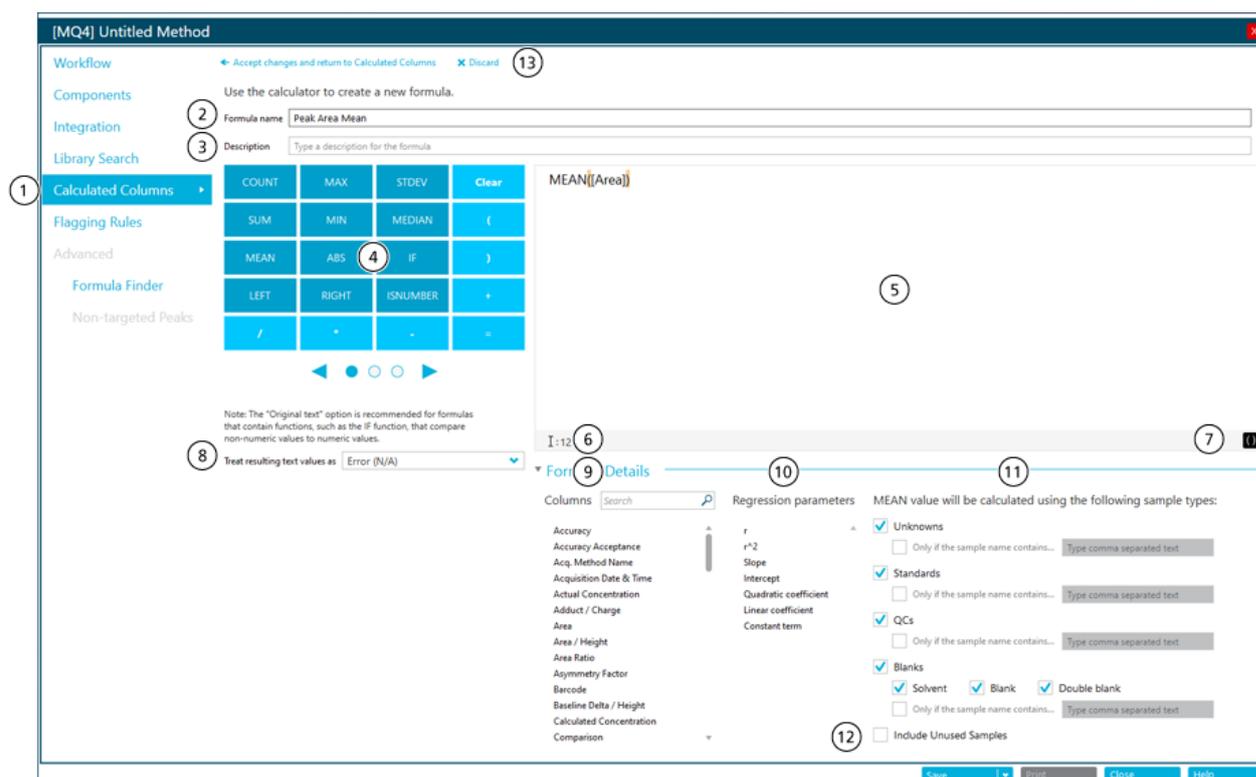
Este documento muestra cómo usar la función de columnas calculadas.

Nota: Las fórmulas se pueden importar y exportar como archivos `frm1` para su uso posterior o uso compartido.

Editor de fórmulas

La siguiente figura muestra la interfaz del editor de fórmulas.

Figura 2-1: Página de fórmulas



Elemento	Descripción
1	El paso Columnas calculadas del flujo de trabajo del método de procesamiento. Haga clic en esta opción para abrir la página Columnas calculadas y, a continuación, haga clic en Añadir > Fórmula .

Fórmulas

Elemento	Descripción
2	<p>El campo Nombre de la fórmula. Escriba un nombre para la fórmula.</p> <hr/> <p>Nota: El nombre de la fórmula no puede contener corchetes ni paréntesis y no debe ser igual que el nombre de una función.</p> <hr/> <p>Nota: Después de usar una fórmula en una regla de marcado u otra fórmula, el nombre de la fórmula no se puede cambiar.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Después del procesamiento, la fórmula se añade como columna en la tabla de resultados. El encabezamiento de columna es el nombre de la fórmula. Para aprovechar mejor el espacio en pantalla, recomendamos que los nombres de fórmula sean cortos. En el campo Descripción se puede incluir información detallada.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Para un cálculo que tiene más de una fórmula, use prefijos significativos y números para identificar la secuencia en la que se usan las fórmulas.</p>
3	<p>El campo Descripción. La descripción se muestra en la página Columnas calculadas.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Si es posible, incluya la fórmula en la Descripción. No será necesario que el usuario abra la fórmula para ver su contenido.</p>
4	<p>Calculadora que contiene funciones y operadores de uso común. Consulte las secciones Referencia de fórmulas y Operadores.</p>
5	<p>El campo Fórmula. Escriba o seleccione las funciones, los operadores, las columnas y los valores que desee usar en las fórmulas.</p>
6	<p>Sección de validación. Si el campo Fórmula contiene errores, aparece un mensaje de error en esta sección. El mensaje identifica la posición en la que se ha producido el error. Por ejemplo, si el usuario introduce la siguiente fórmula:</p> <pre>IFS([Sample Type] == 'Standard'; 'Yes'; 'No')</pre> <p>aparece este mensaje de error:</p> <pre>La fórmula contiene una función no válida en la posición 1: IFS.</pre>
7	<p>Opción para aplicar resaltado a los paréntesis del campo Fórmula.</p>

Elemento	Descripción
8	Conjunto de opciones que controlan lo que se hace con las entradas de texto. El campo Tratar los valores de texto resultantes como es importante en las columnas de la tabla de resultados que pueden contener salidas tanto numéricas como de texto, por ejemplo N/A, degenerate, <0, <0, >0, not enough points, less than <i>n</i> points y el símbolo de infinito. Para obtener más información, consulte la sección Opción Tratar los valores de texto resultantes como
9	Columnas disponibles de la tabla de resultados. Haga clic en una columna para añadirla al campo de fórmula.
10	<p>Parámetros de regresión disponibles. Haga clic en un parámetro para añadirlo al campo de fórmula.</p> <hr/> <p>Nota: Los parámetros de regresión solo se muestran en el panel Curva de calibración. No se incluyen como columnas en la tabla de resultados.</p> <hr/> <p>Nota: Los parámetros de regresión solo se admiten en columnas calculadas para tipos de regresión lineal, lineal a cero, cuadrática y cuadrática por cero. No se admiten para los tipos de regresión de Potencia, Wagner, Hill o Factor de respuesta promedio.</p>
11	<p>Tipos de muestras disponibles. Seleccione los tipos de muestras sobre las que actuará la función.</p> <hr/> <p>Nota: Esta sección se muestra para funciones agregadas, es decir, funciones que actúan sobre varias filas.</p>
12	<p>Opción para incluir muestras para las que no está seleccionada la casilla Uso.</p> <hr/> <p>Nota: Esta sección se muestra para funciones agregadas. De forma predeterminada, solo se incluyen en los cálculos que usan funciones agregadas las filas con la casilla Uso seleccionada.</p>
13	Opciones para guardar o descartar la fórmula.

Aritmética simple

Se pueden crear fórmulas sencillas para realizar operaciones matemáticas básicas.

Ejemplo: R²

[r] * [r]

Fórmulas

En este ejemplo, se usa el operador de multiplicación (*) para multiplicar el valor R por sí mismo para calcular el valor R².

Ejemplo: Puntos por segundo recopilados

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

En este ejemplo, los puntos a lo largo de la línea de referencia se dividen entre los segundos desde el principio hasta el final de un pico cromatográfico integrado. Esta fórmula utiliza los operadores de división (/), multiplicación (*) y resta (-).

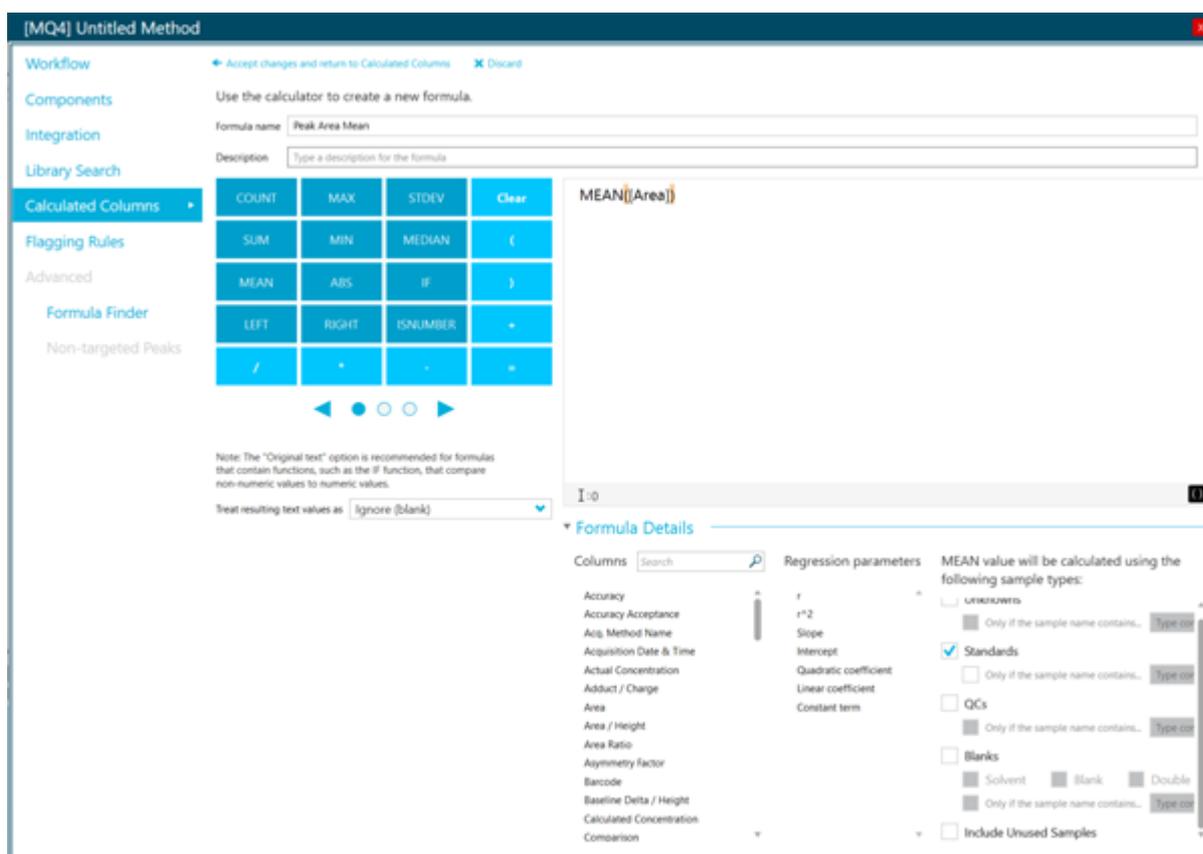
Funciones más complejas

Hay disponibles muchas otras funciones y estructuras de control. Algunas funciones comunes, como **MEAN**, **MAX** y **MIN** se muestran en la calculadora bajo la barra de fórmulas. Para ver una lista completa de los detalles de sintaxis, los operadores y las funciones, pulse **F1** en la página del editor de fórmulas.

Ejemplo: MEAN([Area]) para patrones

Cuando se utiliza una función que opera sobre todos los valores, el usuario puede seleccionar las muestras que se incluirán en el cálculo.

Figura 2-2: Obtener la media del área de pico solo de las muestras estándar



Ejemplo: integrar funciones

Se pueden integrar funciones aritméticas simples y más complejas. Por ejemplo, para calcular los puntos medios por segundo recopilados, utilice la siguiente fórmula:

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

Nota: No se recomienda la combinación de funciones agregadas. Cree una columna distinta para cada función agregada y, a continuación, cree una fórmula que use esas columnas.

Función IF

La función **IF** lleva a cabo una prueba lógica y da un resultado `true` o `false`. Utilice funciones **IF** anidadas para probar más de una condición. La función **IF** se puede usar con otras funciones lógicas como **y** y **o** para ampliar una prueba lógica.

La sintaxis básica de la instrucción **IF** es la siguiente:

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

Donde:

- *condition* es un valor o una expresión lógica que puede resultar ser verdadera o falsa.
- *value if true* es un valor que se debe mostrar en la columna relacionada de la tabla de resultados cuando la *condition* es verdadera.
- *value if false* es un valor que se debe mostrar en la columna relacionada de la tabla de resultados cuando *condition* es falsa.

Nota: Se pueden usar los caracteres `&&` y `||` para **y** y **o**, respectivamente. Los operadores **y** y **o** deben estar rodeados por espacios, pero los operadores `&&` y `||`, no.

Nota: El símbolo de función **IF** se puede seleccionar desde la calculadora, escribir o copiar desde otra fuente. La función **IF** no distingue entre mayúsculas y minúsculas.

Nota: En las instrucciones **IF** con más de una `<condition>`, si el usuario no evalúa ni siquiera una `<condition>`, entonces se muestra una salida `<value if false>` en la columna personalizada en la Tabla de resultados.

La función **IF** también permite utilizar otras funciones numéricas en la fórmula, como **Media** y **STDEV**, en las expresiones *condition*, *value if true* o *value if false*.

Fórmulas

condition

Algunos ejemplos de una *condition* son:

```
[Area]>5000
```

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

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

value if true y value if false

Tanto *value if true* como *value if false* pueden ser numéricos o de texto.

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

Nota: Los saltos de línea no son válidos en las fórmulas. Si se pega una fórmula de ejemplo en el campo de fórmula, elimine los saltos de línea.

Operadores

Tabla 2-1: Operadores (incluidos en la calculadora)

Operador	Descripción
/	Divide el valor de antes del operador entre el valor de después del operador.
*	Multiplica el valor de antes del operador por el valor de después del operador.
-	Resta el valor de antes del operador del valor de después del operador.
=	Muestra la salida de la función.
+	Suma el valor de antes del operador al valor de después del operador.
()	Especifica el orden de operación. Ponga los cálculos que hay que realizar primero entre paréntesis.

Tabla 2-2: Comparación y operadores lógicos (se pueden introducir manualmente)

Operador	Descripción
<	Si el valor de antes del operador es menor que el valor que sigue al operador, el resultado es <code>true</code> . En otro caso, el valor es <code>false</code> .

Tabla 2-2: Comparación y operadores lógicos (se pueden introducir manualmente) (continuación)

Operador	Descripción
<=	Si el valor de antes del operador es menor o igual que el valor que sigue al operador, el resultado es <code>true</code> . En otro caso, el valor es <code>false</code> .
>	Si el valor de antes del operador es mayor que el valor que sigue al operador, el resultado es <code>true</code> . En otro caso, el valor es <code>false</code> .
>=	Si el valor de antes del operador es mayor o igual que el valor de después del operador, el resultado es <code>true</code> . En otro caso, el valor es <code>false</code> .
!=	Si el valor de antes del operador no es igual que el valor de después, el resultado es <code>true</code> . En otro caso, el valor es <code>false</code> .
&&	Si las expresiones de antes y después del operador son las dos verdaderas, el resultado es <code>true</code> . Si alguna de las dos expresiones es falsa, el resultado es <code>false</code> . Carácter que representa el operador booleano y . En las fórmulas, se puede usar && , y o ambos.
	Si la expresión de antes o de después del operador es verdadera, el resultado es <code>true</code> . Si las dos expresiones son falsas, el resultado es <code>false</code> . Carácter que representa el operador booleano o . En las fórmulas, se puede usar , o o ambos.
<code>true</code>	Para las columnas que contienen casillas, identifica las columnas cuya casilla está seleccionada. Ejemplo ¹ : <code>IF([Sample Type] = 'Standard'&&[Used] = true&&[Reportable] = true; 'Qualified STD reported'; '')</code>
<code>false</code>	Para las columnas que contienen casillas, indica las columnas cuya casilla no está seleccionada.

Opción Tratar los valores de texto resultantes como

La opción **Tratar los valores de texto resultantes como** controla cómo se interpreta el texto en una columna de una tabla de resultados personalizada que contiene texto o una combinación de números y texto. Por ejemplo, la columna **Tipo de muestra** solo contiene texto, la columna **Masa precursora** contiene valores numéricos y la columna **Concentración calculada** puede contener tanto valores numéricos como texto.

¹ Los saltos de línea no son válidos en las fórmulas. Si se pega una fórmula en el campo de fórmula, elimine los saltos de línea.

Fórmulas

Para cada fórmula, el usuario puede definir la opción **Tratar los valores de texto resultantes como** con el valor aplicable a las funciones utilizadas en esa fórmula. Están disponibles los siguientes valores:

- **Cero**
- **Ignorar (blanco)**
- **Error (N/A)**
- **Texto original**

Nota: Para obtener más información acerca de estas opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Si los cálculos se hacen con las siguientes funciones, las opciones recomendadas son **Cero**, **Ignorar (blanco)** o **Error (N/A)**: **RECuento**, **MAX**, **STDEV**, **SUM**, **MIN**, **MEDIAN**, **GET**, **GETGROUP**, **SLOPE**, **INTERCEPT**, **MAD**, **GETSTAT**, **GETSAMPLECLOSEST**, **GETSAMPLECLOSESTHIGH**, **GETSAMPLECLOSESTLOW** o **GETSAMPLEEQUAL**. Estas opciones también se recomiendan en las instrucciones **IF** cuando la fórmula contiene columnas que podrían tener valores numéricos.

La opción recomendada para la concatenación de valores de texto es **Texto original**.

Ejemplo

En este ejemplo se concatenan dos columnas que contienen valores de texto. Para este caso, se recomienda la opción **Texto original**.

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

Esta fórmula añade una columna de resumen que contiene el nombre de la muestra y su tipo. Por ejemplo, si el nombre de la muestra es *Calibrador 1* y el tipo es *Patrón*, la columna calculada contiene *Calibrador 1 Patrón*. Para esta fórmula, **Tratar los valores de texto resultantes como** se establece en **Texto original**.

El ' ' añade un espacio.

Extracción simple de información no predeterminada

La función de columnas calculadas permite mostrar información que no está disponible de forma predeterminada en las tablas de resultados.

Por ejemplo, para mostrar R^2 como columna de la tabla de resultados, haga clic en **R^2** en la lista **Parámetros de regresión**.

Figura 2-3: Crear una columna personalizada con columnas calculadas

[MQ4] Modify Method

Workflow ← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Components Use the calculator to create a new formula.

Integration Formula name

Library Search Description

Calculated Columns

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

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

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

Formula Editor:

Formula Details

Columns

Regression parameters

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Acq. Method Name
- Acquisition Date & Time
- Actual Concentration
- Adduct / Charge
- Area
- Area / Height
- Area Ratio
- Area Ratio of comparison
- Asymmetry Factor
- Barcode
- Baseline Delta / Height
- Calculated Concentration
- r
- r^2
- Slope
- Intercept
- Quadratic coefficient
- Linear coefficient
- Constant term

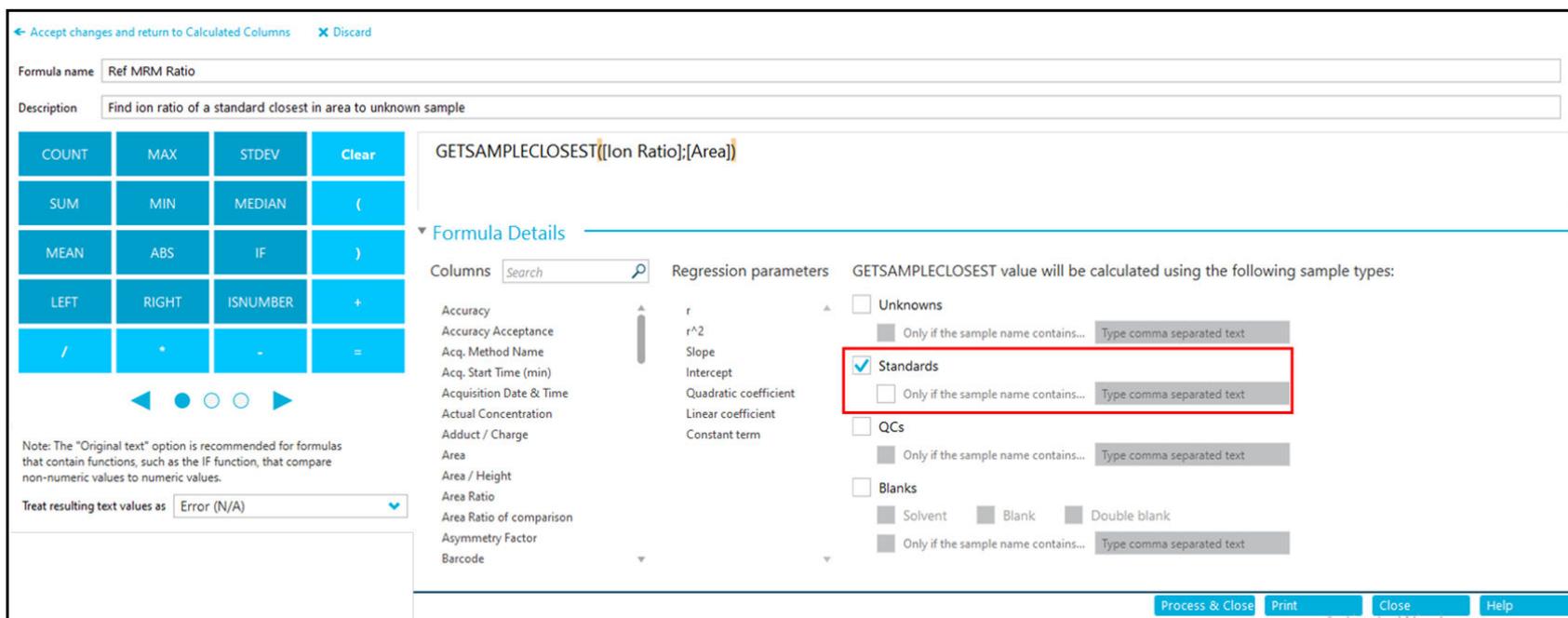
Process & Close Print Close Help

Ejemplos: fórmulas

Funciones GET

Obtener la proporción de iones del patrón con el área más parecida a la muestra desconocida (GETSAMPLECLOSEST)

Figura 2-4: Fórmula: Ref MRM Ratio



Nota: En la siguiente tabla se ofrece un resumen de la configuración que se muestra en la figura anterior.

Tabla 2-3: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSEST ([Ion Ratio]; [Area])	Proporción de iones de un patrón con el área más parecida a las demás muestras. Consulte la columna 1 de la figura: Figura 2-5	Patrones	Error (N/A)	No

Fórmulas

Figura 2-5: Tabla de resultados: columnas calculadas con Ref MRM Ratio, High Ref MRM Ratio, Low Ref MRM Ratio, Equal Ref MRM Ratio

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

GETSAMPLECLOSESTHIGH, GETSAMPLECLOSESTLOW y GETSAMPLEEQUAL

Tabla 2-4: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
High Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio];[Area])	La proporción de iones del patrón más cercano que tenga un área mayor o igual que el área de la muestra desconocida. Consulte la columna 2 de la figura: Figura 2-5	Patrones	Error (N/A)	No
Low Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTLOW ([Ion Ratio];[Area])	La proporción de iones del patrón más cercano que tenga un área menor o igual que el área de la muestra desconocida. Consulte la columna 3 de la figura: Figura 2-5	Patrones	Error (N/A)	No
Equal Ref MRM Ratio	GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio];[Area])	El resultado de GETSAMPLEEQUAL solo para patrones. Consulte la columna 4 de la figura: Figura 2-5	Patrones	Error (N/A)	No

Fórmulas

Compare el área de dos muestras consecutivas: **GETVALUE** para análisis de la recuperación y el arrastre

Tabla 2-5: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Previous SampleIndex	[Sample Index]-1	Índice de la muestra anterior en la tabla de resultados.	N/A	Error (N/A)	N/A
Previous SampleArea	GETVALUE ([Area]; [PreviousSampleIndex]; [Sample Index])	Áreas de los componentes de la muestra que se adquirió antes de esta.	Patrones	Error (N/A)	No

Figura 2-6: Tabla de resultados: 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

Fórmulas

Mover valores de dos transiciones a una fila: GETGROUP

Tabla 2-6: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
GET Ametryn Group CalcConc	GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 1')+ GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 2')	Concentración total calculada para Ametrina 1 y Ametrina 2.	Desconocidos	Error (N/A)	No
GETGROUP Qual CalcConc	GETGROUP ([Calculated Concentration]; 2)	Concentración calculada para la segunda transición del grupo.	Desconocidos	Error (N/A)	No

Figura 2-7: Tabla de resultados: GET Ametryn Group CalcConc y 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

Fórmulas

Hacer que los valores estadísticos estén disponibles para el marcado y la generación de informes: GETSTAT

Tabla 2-7: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
CV%STD	<code>GETSTAT('Percent CV'; 'Calculated Concentration')</code>	Valor CV porcentual para la Concentración calculada de la tabla de estadísticas para patrones y QC.	N/A	Error (N/A)	N/A
Av_RT_Prefix	<code>GETSTAT('MEAN'; 'Retention Time'; 'Sample Name Prefix')</code>	Valor medio para Tiempo de retención para muestras agrupadas por Prefijo del nombre de la muestra .	Patrones	Error (N/A)	No

Figura 2-8: Tabla de resultados: 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

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

Fórmulas

Figura 2-9: Tabla de resultados: 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

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

Funciones agregadas

Las funciones agregadas son funciones que se aplican a varias filas. Por ejemplo, la función **MIN** encuentra el valor más bajo para una columna en todas las filas de la tabla de resultados. La función **MEAN** calcula el valor medio de una columna.

Tabla 2-8: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
STD COUNT Area	COUNT ([Area])	Número de valores que se han encontrado para el área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No
STD MAX Area	MAX ([Area])	El valor más alto que se ha encontrado para el área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No
STD MEAN Area	MEAN ([Area])	Valor medio para el área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No
STD MEDIAN Area	MEDIAN ([Area])	Valor de la mediana para el área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No
STD MIN Area	MIN ([Area])	Valor mínimo para el área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No
STD STDEV Area	STDEV ([Area])	Desviación estándar del valor del área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No

Fórmulas

Tabla 2-8: Configuración (continuación)

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
STD SUM Area	SUM ([Area])	Valor total para todos los valores del área para muestras estándar	Patrones	Ignorar	No

Figura 2-10: Tabla de resultados: funciones agregadas

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	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
56	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	74351.280	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
67	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	783230.401	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
78	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	778397.852	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
89	STD 1	Standard	Ametryn 1	7933715.370	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
100	STD 1	Standard	Ametryn 1	7836685.698	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
111	STD 10	Standard	Ametryn 1	81066809.991	<input checked="" type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000
▶ 122	STD 10	Standard	Ametryn 1	79964706.071	<input type="checkbox"/>	74351.280	81066809.991	14078224.550	98547571.847	783230.401	29749063.663	7.000

Funciones numéricas

Tabla 2-9: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Rounded Calc. Conc	ROUND([Calculated Concentration];3)	Concentración calculada redondeadas a 3 decimales.	N/A	Error (N/A)	N/A
Calc. Conc Ceiling	CEILING([Calculated Concentration])	El entero más pequeño que sea mayor (o igual) que la Concentración calculada.	N/A	Error (N/A)	N/A
Calc. Conc Floor	FLOOR([Calculated Concentration])	El entero más grande que sea menor (o igual) que la Concentración calculada.	N/A	Error (N/A)	N/A

Fórmulas

Figura 2-11: Tabla de resultados: funciones numéricas

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	<input checked="" type="checkbox"/>	Decimal	0.0	<input type="checkbox"/>
Floor	<input checked="" type="checkbox"/>	Decimal	0	<input type="checkbox"/>
Rounded Calc. Conc.	<input checked="" type="checkbox"/>	Decimal	0.000	<input type="checkbox"/>

Column display settings are saved as a part of a layout OK Cancel

Nota: En este ejemplo, la función **ROUND** usa tres decimales, como se muestra en la fórmula: **ROUND** ([Concentración calculada]; 3) . La función **CEILING** obtiene el entero más pequeño que sea mayor o igual que la **Concentración calculada**. El valor se configura como un decimal en el cuadro de diálogo Configuración de la visualización de la tabla de resultados. La función **FLOOR** obtiene el entero más grande que sea menor o igual que la **Concentración calculada**. El valor se configura como cero decimales en el cuadro de diálogo Configuración de la visualización de la tabla de resultados.

Formato de número

Tabla 2-10: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Calc. Conc. Format	IF([Calculated Concentration]<1;TEXT([Calculated Concentration];'#0.00');IF([Calculated Concentration]<10;TEXT([Calculated Concentration];'#0.0');TEXT([Calculated Concentration];'#,###'))	Concentración calculada con el formato adecuado según los límites para el resultado.	N/A	Error (N/A)	N/A

Funciones de texto

Usar la concentración calculada para identificar picos que hay que revisar: ISNUMBER

Tabla 2-11: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Calc. Conc. Review	<code>ISNUMBER([Calculated Concentration])</code>	<i>true</i> si Concentración calculada contiene un número, o <i>false</i> en caso contrario.	N/A	Error (N/A)	N/A
Review Peak	<code>ISNUMBER([Calc. Conc. Review]= true; [Area]; 'Review Needed')</code>	Si la concentración calculada es un número, el área. Si la concentración calculada es un texto, "Se necesita revisión".	N/A	Error (N/A)	N/A

Figura 2-12: Tabla de resultados: Calc. Conc. Review y 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

Fórmulas

Extraer información de las columnas Sample ID y Barcode: LEFT, TRIM y RIGHT

Tabla 2-12: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Assay	LEFT ([Sample ID];4)	Los cuatro primeros caracteres (letras o números) de ID de la muestra .	N/A	Error (N/A)	N/A
Barcode Trim	TRIM ([Barcode])	El contenido de la columna Código de barras con todos los espacios eliminados.	N/A	Error (N/A)	N/A
Req #	RIGHT ([Barcode Trim];8)	Los últimos ocho caracteres de Barcode Trim.	N/A	Error (N/A)	N/A

Figura 2-13: Tabla de resultados: columnas calculadas con las funciones LEFT, TRIM y RIGHT

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_Benzoylecgonine 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

Elemento	Descripción
1	Los cuatro primeros caracteres de la columna ID de la muestra .
2	Se eliminan de la columna Código de barras todos los espacios situados al principio, al final o en medio del texto, salvo los que separan las cadenas.

Fórmulas

Elemento	Descripción
3	Los ocho últimos caracteres de la columna Barcode Trim.

Nota: No se recomienda usar las funciones **LEFT** y **RIGHT** con columnas numéricas. El valor de **Precisión del formato de número** de los valores numéricos que se aplican en el cuadro de diálogo Configuración de la visualización de la tabla de resultados no se incluye en el cálculo. Estas funciones operan sobre el valor subyacente completo.

Formato de texto

Tabla 2-13: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Date Format 1	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'yyyy-MMMM-dd')	2022-May-04	N/A	Error (N/A)	N/A
Date Format 2	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'MM/dd/yyyy')	05/04/2022	N/A	Error (N/A)	N/A
Date Format 3	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'dddd MMM dd, yyyy')	Wednesday May 04, 2022	N/A	Error (N/A)	N/A

Función IF

Usar el área media para patrones internos para hacer una prueba de rendimiento de patrones internos

El valor medio del área del patrón interno (IS) se calcula entre las muestras oportunas y se compara con un valor de 1e6. Si **MEDIA ([IS Area])** es mayor que 1e6, es decir, si la *condition* es verdadera, el valor medio del área de IS se muestra en la columna correspondiente de la tabla de resultados. Si **MEDIA ([IS Area])** es menor que 1e6, es decir, si la *condition* es falsa, se muestra **Revisar rendimiento de IS**.

Tabla 2-14: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
IS Performance	IF (MEAN ([IS Area]) >=1e6; MEAN ([IS Area]); 'Review IS performance')	Si es verdadera, el valor medio del área de IS; si es falsa, el texto Revisar rendimiento de IS	N/A	Error (N/A)	N/A

Fórmulas

Asegúrese de que el tiempo de retención del analito en la muestra desconocida es el mismo que el del patrón de calibración, con una tolerancia de $\pm 0,1$ minutos

Tabla 2-15: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
RT_Check	IF ([Sample Type]='Unknown'; IF (ABS (MEAN ([Retention Time]- [Retention Time])<=0.1; 'RT Pass'; 'RT Fail'); 'N/A')	Si la diferencia entre el tiempo de retención para la muestra y el tiempo de retención para el estándar es más de 0,1: RT Fail. Si es menos: RT Pass. Si la muestra no es desconocida, N/A.	Patrones	Error (N/A)	No
STD Mean RT	MEAN ([Retention Time])	Tiempo de retención medio para todas las muestras estándar.	Patrones	Ignorar	No
RT delta	ABS ([STD Mean RT]- [Retention Time])	Valor absoluto de la diferencia entre el tiempo de retención medio y el tiempo de retención para la muestra.	Todo	Error (N/A)	No
Check RT delta	IF ([RT delta]>0.1; 'RT Fail'; 'RT Pass')	Si la diferencia entre el tiempo de retención para la muestra y el tiempo de retención para la desconocida es más de 0,1: RT Fail. Si es menos: RT Pass.	N/A	Error (N/A)	No

Tabla 2-15: Configuración (continuación)

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
Check RT Unknowns	IF ([Sample Type]='Unknown'; [Check RT delta]; 'N/A')	Muestras desconocidas en la salida de Check RT delta.	N/A	Error (N/A)	No

Fórmulas

Figura 2-14: Tabla de resultados: 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	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
12	Solvent	Solvent	Ametryn 1	N/A	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
23	Double Blank	Double Blank	Ametryn 1	2.75	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.557	RT Fail	N/A
34	Blank	Blank	Ametryn 1	2.26	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.070	RT Pass	N/A
45	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
56	STD 0.01	Standard	Ametryn 1	2.19	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.003	RT Pass	N/A
67	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	2.18	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.008	RT Pass	N/A
78	STD 0.1	Standard	Ametryn 1	2.19	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
89	STD 1	Standard	Ametryn 1	2.18	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.009	RT Pass	N/A
100	STD 1	Standard	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.013	RT Pass	N/A
111	STD 10	Standard	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.007	RT Pass	N/A
122	STD 10	Standard	Ametryn 1	2.19	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.001	RT Pass	N/A
133	Double Blank	Double Blank	Ametryn 1	N/A	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
144	Low QC	Quality Control	Ametryn 1	2.19	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.001	RT Pass	N/A
155	Medium QC	Quality Control	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.013	RT Pass	N/A
166	High QC	Quality Control	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	0.004	RT Pass	N/A
177	Blank	Blank	Ametryn 1	N/A	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	2.192	N/A	RT Pass	N/A
188	Unknown 1	Unknown	Ametryn 1	2.19	<input checked="" type="checkbox"/>	RT Pass	2.192	0.003	RT Pass	RT Pass
199	Unknown 1	Unknown	Ametryn 1	2.18	<input checked="" type="checkbox"/>	RT Pass	2.192	0.010	RT Pass	RT Pass
210	Unknown 2	Unknown	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	RT Pass	2.192	0.006	RT Pass	RT Pass
221	Unknown 2	Unknown	Ametryn 1	2.20	<input checked="" type="checkbox"/>	RT Pass	2.192	0.005	RT Pass	RT Pass

Utilizar las señales cualitativas de Confianza en la proporción de iones para identificar picos que requieran revisión

La función **IF** puede usarse para hacer una prueba de las columnas que contienen señales cualitativas. Las señales cualitativas pueden tener los siguientes valores: *Rojo*, *Amarillo*, *Verde* y *Gris*.

Tabla 2-16: Configuración

Nombre	Fórmula	Salida	Tipos de muestra	Tratar los valores de texto resultantes como	Incluir muestras no utilizadas
MRM Ratio Fails	<code>IF([Ion Ratio Confidence]='Red' [Ion Ratio Confidence]='Yellow' [Ion Ratio Confidence]='Grey'; 'Needs Revision'; 'Pass')</code>	Si Confianza en la proporción de iones es de color rojo, amarillo o gris: Needs Revision. Si no, Pass.	N/A	Error (N/A)	N/A

Fórmulas

Figura 2-15: Tabla de resultados: 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

Búsqueda condicional

3

Una columna de búsqueda condicional contiene un valor que se controla mediante el valor de otra columna, tal como se especifica en una entrada de la tabla de búsqueda condicional.

Las entradas de la tabla de búsqueda condicional contienen esta información:

- Una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada
- Una condición, como **Igual que**
- Un valor de búsqueda
- El valor de salida se debe mostrar en la columna de búsqueda condicional de la tabla de resultados

Si la columna de búsqueda usa varias condiciones, estas se usan con el operador booleano AND (no OR). Si la combinación de condiciones es falsa, es decir, que no tiene resultados, se usa el valor del campo **Salida predeterminada**.

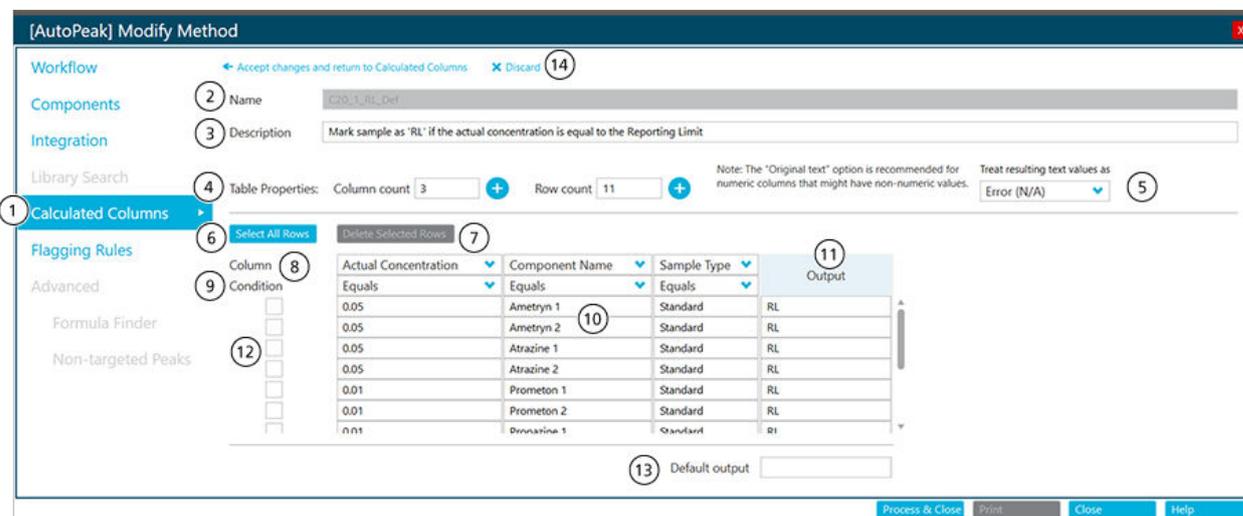
Durante el procesamiento, se crea una columna de la tabla de resultados para cada búsqueda condicional. Si al menos un resultado de la columna es numérico, la columna es numérica y se puede seleccionar un formato de número para la columna. Si ninguno de los resultados de la columna es numérico, la columna es de texto.

Se puede usar el marcado para las columnas de la tabla de resultados creadas con la búsqueda condicional. Estas columnas también se pueden usar en las fórmulas.

Editor de búsqueda condicional

La siguiente imagen muestra la interfaz para el editor de búsqueda condicional.

Figura 3-1: Editor de búsqueda condicional



Búsqueda condicional

Elemento	Descripción
1	El paso Columnas calculadas del flujo de trabajo del método de procesamiento. Haga clic en esta opción para abrir la página Columnas calculadas y, a continuación, haga clic en Añadir > Búsqueda condicional .
2	El campo Nombre . Escriba un nombre para la fórmula. <hr/> Sugerencia: La búsqueda condicional se añade como columna en la tabla de resultados después del procesamiento. El encabezamiento de columna es el nombre de la búsqueda condicional. Para aprovechar mejor el espacio en pantalla, recomendamos que los nombres sean cortos. En el campo Descripción se puede incluir información detallada. <hr/>
3	El campo Descripción . La descripción se muestra en la página Columnas calculadas.
4	Número de filas y columnas de la tabla. Para cambiar el número de columnas o filas, escriba un número en el campo Número de columnas o Número de filas . O bien haga clic en el signo  correspondiente para añadir una columna o una fila.
5	Conjunto de opciones que controlan lo que se hace con las entradas de texto. El campo Tratar los valores de texto resultantes como es importante en las columnas de la tabla de resultados que podrían contener salidas tanto numéricas como de texto, como N/A y los símbolos para deteriorada e infinito. Para obtener más información, consulte la sección Opción Tratar los valores de texto resultantes como
6	Haga clic en esta opción para seleccionar todas las filas.
7	Haga clic para eliminar las filas seleccionadas.
8	Las columnas que se utilizarán en la búsqueda condicional. Se pueden usar columnas de texto personalizadas, columnas calculadas y columnas de búsqueda condicional. <hr/> Nota: Este campo tiene un menú contextual que se puede usar para añadir, eliminar, copiar y pegar columnas. <hr/>

Elemento	Descripción
9	<p>Condición que se va a usar en la tabla de búsqueda condicional. Las condiciones disponibles incluyen las siguientes:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Igual que • No igual • Empieza por • Contiene • Menor que • Menor o igual que • Mayor que • Mayor o igual que
10	<p>Valor que se va a usar en la instrucción condicional. El valor debe ser correcto para el tipo de columna de la tabla de resultados. El valor puede ser numérico, booleano (true o false) o texto.</p> <hr/> <p>Nota: Este campo tiene un menú contextual que se puede usar para añadir, eliminar, copiar y pegar columnas y filas.</p> <hr/>
11	<p>El valor o el texto que se mostrará en la columna de búsqueda condicional cuando se cumplan todas las condiciones.</p> <hr/> <p>Nota: Este campo tiene un menú contextual que se puede usar para añadir, eliminar, copiar y pegar columnas y filas.</p> <hr/>
12	<p>Marque la casilla para seleccionar una fila para eliminar.</p>
13	<p>El valor o el texto que se mostrará en la columna de búsqueda condicional cuando no se cumpla ninguna de las condiciones.</p> <hr/> <p>Nota: Este campo tiene un menú contextual que se puede usar para cortar, copiar y pegar contenido en este campo.</p> <hr/>
14	<p>Opciones para guardar o descartar la búsqueda condicional.</p>

Ejemplos: búsqueda condicional

Ejemplo: límite notificable inferior y superior controlado por analito (Nombre del compuesto) y tipo de matriz de la muestra (ID de la muestra)

Figura 3-2: Tabla de búsqueda condicional: valor de Salida establecido en un límite notificable inferior relacionado con el analito y el tipo de matriz de la muestra

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

Components Name:

Integration Description:

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

Table Properties: Column count: [+](#) Row count: [+](#) Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values. Treat resulting text values as:

Select All Rows Delete Selected Rows

Column	Component Name	Sample ID	Output
<input type="checkbox"/>	Equals	Equals	
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Urine	0.01
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Serum	0.025
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Oral Fluid	0.01
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Hair	0.025
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Urine	0.001
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Serum	0.0025
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Oral Fluid	0.001
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Hair	0.0025
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Urine	0.001
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Serum	0.001
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Oral Fluid	0.001
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Hair	0.001
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Urine	0.01
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Serum	0.05
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Oral Fluid	0.025
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Hair	0.05

Default output:

[Process & Close](#) [Print](#) [Close](#) [Help](#)

Figura 3-3: Tabla de búsqueda condicional: valor de Salida establecido en un límite notificable superior relacionado con el analito y el tipo de matriz de la muestra

Workflow

Components

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

← Accept changes and return to Calculated Columns
✕ Discard

Name:

Description:

Table Properties: Column count + Row count +

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

Select All Rows Delete Selected Rows

Column	Component Name	Sample ID	Output
<input type="checkbox"/>	Equals	Equals	
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Urine	1000
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Serum	100
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Oral Fluid	10
<input type="checkbox"/>	BZE 1	Hair	1
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Urine	1000
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Serum	100
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Oral Fluid	10
<input type="checkbox"/>	Cocaethylene 1	Hair	1
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Urine	1000
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Serum	100
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Oral Fluid	10
<input type="checkbox"/>	Cocaine 1	Hair	1
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Urine	10
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Serum	10
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Oral Fluid	5
<input type="checkbox"/>	m-OH-BZE 1	Hair	1

Default output:

Process & Close
Print
Close
Help

Búsqueda condicional

Figura 3-4: Tabla de resultados: columnas de búsqueda condicional LRL y URL

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

Ejemplo: el factor de dilución que se debe usar para las concentraciones calculadas de muestras desconocidas (Tipo de muestra) controladas por el tipo de matriz de la muestra (ID de la muestra)

Figura 3-5: Tabla de búsqueda condicional: valor de Salida establecido en un factor de dilución relacionado con el tipo de matriz de la muestra

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Name:

Description:

Table Properties: Column count + Row count +

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

Column	Sample Type ▾	Sample ID ▾	Output
Condition	Equals ▾	Equals ▾	
<input type="checkbox"/>	Unknown	Oral Fluid	3
<input type="checkbox"/>	Unknown	Hair	2
<input type="checkbox"/>			

Default output

Búsqueda condicional

Figura 3-6: Fórmula: columna de búsqueda condicional aplicada a Concentración calculada

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Formula name:

Description:

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

[Calculated Concentration]*[x Dil. Factor]

▼ Formula Details

Columns: ✕ Regression parameters

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

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:

Process & Close Print Close Help

Figura 3-7: Tabla de resultados: concentración calculada ajustada

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

La **Precisión del formato de número** de los valores numéricos que se aplica en el cuadro de diálogo Configuración de la visualización de la tabla de resultados no se incluye en las fórmulas matemáticas. Las fórmulas operan con el valor subyacente completo.

Búsqueda condicional

Ocurre lo mismo con la comparación de valores numéricos. Cuando se aplica una búsqueda condicional a un número de la tabla de resultados, el número de la tabla de búsqueda condicional debe ser el mismo que el valor subyacente completo con hasta 15 dígitos significativos. Si se hace la comparación con el número mostrado en la tabla de resultados, puede que no se dé esa coincidencia.

Figura 3-8: Precisión del formato de número=2

Column Name	Visible	Number Format	Number Format Precision
Expected RT	<input checked="" type="checkbox"/>	Decimal	0.00

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

Name:

Description:

Table Properties: Column count [+](#) Row count [+](#) Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values. Treat resulting text values as [v](#)

[Select All Rows](#) [Delete Selected Rows](#)

Column	Component...	Expected RT	Output
Condition	Equals	Equals	
<input type="checkbox"/>	Methadone 105	2.38	On time
<input type="checkbox"/>	Tapentadol 107	1.86	On time
<input type="checkbox"/>			

Default output

[Process & Close](#) [Print](#) [Close](#) [Help](#)

Figura 3-9: Tabla de resultados: Precisión del formato de número=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	

Búsqueda condicional

Figura 3-10: Fórmula: Precisión del formato de número=3

Column Name	Visible	Number Format	Number Format Precision
Expected RT	<input checked="" type="checkbox"/>	Decimal	0.0000000000000000

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

Name:

Description:

Table Properties: Column count [+](#) Row count [+](#)
Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values.
Treat resulting text values as

[Select All Rows](#)
[Delete Selected Rows](#)

Column	Component...	Expected RT	Output
Condition	Equals	Equals	
<input type="checkbox"/>	Methadone 105	2.383	On time
<input type="checkbox"/>	Tapentadol 107	1.864	On time
<input type="checkbox"/>			

Default output:

[Process & Close](#)
[Print](#)
[Close](#)
[Help](#)

Figura 3-11: Tabla de resultados: Precisión del formato de número=3

Component Name	Expected RT	*Numeric Comparison
Methadone 105	2.383000000000000	On time
Tapentadol 107	1.864000000000000	On time
Methadone 105	2.383000000000000	On time
Tapentadol 107	1.864000000000000	On time
Methadone 105	2.383000000000000	On time
Tapentadol 107	1.864000000000000	On time
Methadone 105	2.383000000000000	On time
Tapentadol 107	1.864000000000000	On time
Methadone 105	2.383000000000000	On time
Tapentadol 107	1.864000000000000	On time
Methadone 105	2.383000000000000	On time

Referencia de fórmulas

A

Tabla A-1: Funciones

Función	Descripción
ABS	Obtiene el valor absoluto del número especificado. Sintaxis: ABS (<i>n</i>) Ejemplo: ABS (-1)
ACOS	Obtiene el ángulo con el coseno que es el valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado. La función ACOS no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir. Sintaxis: ACOS (<i>n</i>) Donde: <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> es el coseno, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.
ASIN	Obtiene el ángulo con el seno que es el valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado. La función ASIN no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir. Sintaxis: ASIN (<i>n</i>) Donde: <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> es el seno, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
ATAN	<p>Obtiene el ángulo con el arco tangente que es el valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado. La función ATAN no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>ATAN (<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> es el arco tangente, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.
CEILING ^{2 3}	<p>Obtiene el entero más pequeño que sea mayor o igual que el valor de la columna especificada de la tabla de resultados o que el número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>CEILING ([<i>Results Table column</i>])</p> <p>Ejemplo: CEILING ([<i>Calculated Concentration</i>])</p>
COS	<p>Obtiene el coseno de un ángulo que se puede especificar como el valor de una columna de la tabla de resultados o como un número. La función COS no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>COS (<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> es el ángulo, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.
RECuento	Obtiene el número de elementos en un conjunto.

² La función puede usarse para funciones dentro de funciones y con números especificados por el usuario.

³ La columna especificada por el usuario a la que se aplican dichas funciones tiene que tener formato de número.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
EXP	<p>Obtiene e elevado a la potencia especificada, que puede ser el valor de una columna de la tabla de resultados o el número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>EXP (<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> es la potencia, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número. <hr/> <p>Nota: Si la potencia es mayor que 709, se muestra N/A.</p> <hr/>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
FIND ⁴	<p>Obtiene la posición de los caracteres especificados en el texto de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada.</p> <p>Sintaxis:</p> <pre>FIND('search string';[Results Table column];n)</pre> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>cadena de búsqueda</i> es el texto o el valor que hay que buscar. • <i>n</i> es la posición del carácter a partir del que se empieza a contar un segmento de texto. <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • La función FIND se puede usar en una función FIND o en otras. • Cuando se usa la función FIND en una función FIND, la función FIND interna se ejecuta primero. La siguiente posición se usa como índice de inicio para la función externa FIND. • Si la función FIND interna devuelve un valor no válido, es decir, si la <i>cadena de búsqueda</i> no se encuentra, la fórmula se trata como no válida y la opción seleccionada para Tratar los valores de texto resultantes como controla el valor de salida. • Si la función FIND se aplica a una entrada no válida y Tratar los valores de texto resultantes como se establece en Texto original, se muestra N/A en la columna relacionada de la tabla de resultados. • La función FIND no admite caracteres comodín.

⁴ El texto que se usa en esta función distingue entre minúsculas y mayúsculas.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
FLOOR ^{2 3}	<p>Obtiene el entero más grande que sea menor o igual que el número de la columna especificada de la tabla de resultados o que el número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>FLOOR(<i>[Results Table column]</i>)</p> <p>Ejemplo: FLOOR(<i>[Calculated Concentration]</i>)</p>
GET	<p>Obtiene el valor para el componente especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GET(<i>[Results-Table-column]</i>; '<i>Component-Name</i>')</p>
GETGROUP	<p>Obtiene el valor para la transición especificada en un grupo.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETGROUP(<i>[Results-Table-column]</i>; <i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> es el número de la transición en el grupo. <hr/> <p>Nota: Si no se han identificado grupos en la sección Componentes, las funciones GETGROUP tratan todos los componentes como miembros del mismo grupo.</p>
GETSAMPLE ^{5 6}	<p>Obtiene valores de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada para la muestra del tipo seleccionado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETSAMPLE(<i>[Results Table column]</i>; '<i>Sample Name</i>')</p> <p>Ejemplo: GETSAMPLE(<i>[Area]</i>; '<i>Low QC</i>')</p>

⁵ Si hay varias muestras que tienen el mismo *Nombre de la muestra*, el software proporciona datos de la primera muestra procesada que tenga una coincidencia.

⁶ Si el *Nombre de la muestra* especificado no se encuentra en la tabla de resultados, el resultado está controlado por la opción seleccionada para **Tratar los valores de texto resultantes como**.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
GETSAMPLECLOSEST ^{7 8 9 10 11}	<p>Obtiene el valor de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada para la muestra del tipo seleccionado que tenga un valor cercano al especificado por el usuario.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETSAMPLECLOSEST([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> es el valor de salida. • <i>Results Table column 2</i> es el valor de entrada. <p>Ejemplo¹²: GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio]; [Area])</p>
GETSAMPLECLOSESTLOW ^{7 8 9 10 11}	<p>Obtiene el valor de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada para la muestra más cercana del tipo seleccionado que tenga un valor menor o igual que el especificado por el usuario.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETSAMPLECLOSESTLOW([Results Table column 1]; [Results Table column 2])</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> es el valor de salida. • <i>Results Table column 2</i> es el valor de entrada. <p>Ejemplo¹²: GETSAMPLECLOSESTLOW([Ion Ratio]; [Area])</p>

⁷ El valor de entrada debe ser una columna numérica.

⁸ La función utiliza la precisión del valor numérico en los datos almacenados para la comparación, no la precisión configurada en la tabla de resultados.

⁹ Si varias muestras procesadas tienen el mismo valor de entrada, el software proporciona datos de la primera muestra procesada que tenga una coincidencia.

¹⁰ Si el valor de entrada especificado no está en la tabla de resultados, el resultado está controlado por la opción seleccionada para **Tratar los valores de texto resultantes como**.

¹¹ Para el valor de entrada está disponible la selección de tipo de muestra.

¹² Los saltos de línea no son válidos en las fórmulas. Si se pega una fórmula en el campo de fórmula, elimine los saltos de línea.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
<p>GETSAMPLECLOSESTHIGH ^{7 8 9 10 11}</p>	<p>Obtiene el valor de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada para la muestra más cercana del tipo seleccionado que tenga un valor mayor o igual que el especificado por el usuario.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETSAMPLECLOSESTHIGH ([<i>Results Table column 1</i>]; [<i>Results Table column 2</i>])</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> es el valor de salida. • <i>Results Table column 2</i> es el valor de entrada. <p>Ejemplo¹²: GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio]; [Area])</p>
<p>GETSAMPLEEQUAL ^{7 8 9 10 11}</p>	<p>Obtiene el valor de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada para la muestra del tipo seleccionado que tenga un valor igual al especificado por el usuario.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETSAMPLEEQUAL ([<i>Results Table column 1</i>]; [<i>Results Table column 2</i>])</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> es el valor de salida. • <i>Results Table column 2</i> es el valor de entrada. <p>Ejemplo: GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio]; [Area])</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
GETSTAT	<p>Añade la columna Media, Desviación estándar, CV porcentual o Exactitud promedio entre réplicas que se muestra en el panel Estadísticas a la tabla de resultados.</p> <p>Sintaxis:</p> <pre>GETSTAT('Statistics-pane-column'; 'Metric'; 'Grouping')</pre> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Statistics-pane-column</i> debe ser exactamente el mismo que el nombre de la columna que se muestra en el panel Estadísticas. • <i>Metric</i> es la propiedad para la que se calculará la estadística. Se pueden calcular estadísticas para Concentración calculada, Área, Altura y Valor Y de calibración. • (Opcional) <i>Agrupación</i> Especifica cómo se pondrán en grupos las muestras de un analito para el cálculo de estadísticas. Están disponibles las opciones siguientes: Concentración real, Nombre de la muestra, ID de la muestra, Prefijo del nombre de la muestra, Comentario sobre la muestra, Código de barras, Código de barras escaneado y Posición de inyección. Si no se especifica una opción de agrupación, se usa Concentración real. <hr/> <p>Nota: Si no se selecciona una opción de agrupación, GETSTAT extrae valores estadísticos (columnas de media, desviación estándar, porcentaje de coeficiente de variación y exactitud promedio entre réplicas) para tipos de muestras estándar y de control de calidad, agrupados por concentración real.</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
<p>GETVALUE⁸</p>	<p>Compara los valores de dos columnas de la tabla de resultados o una columna de la tabla de resultados y un valor especificado por el usuario. Cuando los valores son los mismos, la función obtiene los valores de una tercera columna de la tabla de resultados. La función GETVALUE no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>GETVALUE ([<i>Results Table Column 1</i>]);<i>n1</i>; [<i>Results Table Column 2</i>]</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Columna 1 de la tabla de resultados</i> es la columna de la que tomará el valor la función cuando <i>n1</i> es igual que <i>Columna 2 de la tabla de resultados</i>. • <i>n1</i> es la columna o el valor especificado por el usuario que se va a usar en la comparación. <i>n1</i> Puede ser una columna de la tabla de resultados, una columna calculada, una columna de texto personalizada, un número o un texto. Las columnas deben ir entre corchetes: []. El texto debe ir entre comillas simples. Los números no deben ir entre comillas. • <i>Columna 2 de la tabla de resultados</i> es una columna de la tabla de resultados, una columna calculada o una columna de texto personalizada que se va a usar en la comparación. <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si hay más de una muestra que tiene el mismo valor de entrada, la función obtiene los datos de la primera muestra que se procese. • Si los valores de entrada no están en la tabla de resultados, el resultado está controlado por la opción seleccionada para Tratar los valores de texto resultantes como. • Para el valor de entrada está disponible la selección de tipo de muestra.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
IEEEREMAINDER	<p>Obtiene el resto que resulta de la división de una columna de la tabla de resultados o de un número especificado por el usuario entre una columna de la tabla de resultados o un número especificado por el usuario. La función IEEEREMAINDER no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>IEEEREMAINDER (<i>n1</i>; <i>n2</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none">• <i>n1</i> es el dividendo, o número que hay que dividir, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.• <i>n2</i> es el divisor, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
<p>IF</p>	<p>Lleva a cabo una prueba lógica y da un resultado true o false. Utilice funciones IF anidadas para probar más de una condición. La función IF se puede combinar con otras funciones lógicas como y y o para ampliar una prueba lógica.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>IF(<i>condition</i>; <i>value if true</i>; <i>value if false</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>condition</i> es un valor o una expresión lógica que puede resultar ser verdadera o falsa. • <i>value if true</i> es un valor que se debe mostrar en la columna relacionada de la tabla de resultados cuando la <i>condition</i> es verdadera. • <i>value if false</i> es un valor que se debe mostrar en la columna relacionada de la tabla de resultados cuando <i>condition</i> es falsa. <hr/> <p>Nota: El símbolo de función IF se puede seleccionar desde la calculadora, escribir o copiar desde otra fuente. La función IF no distingue entre mayúsculas y minúsculas.</p> <hr/> <p>Nota: Se pueden usar los caracteres && y para y y o, respectivamente. Los operadores y y o deben estar rodeados por espacios, pero los operadores && y , no.</p> <hr/> <p>Las funciones numéricas se pueden usar en una fórmula con una función IF. Las funciones numéricas, por ejemplo MEAN y STDEV, se pueden usar en las <i>condition</i>, <i>value if true</i> o <i>value if false</i>.</p> <p>Las condiciones IF pueden probar las señales cualitativas de confianza para estas columnas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Confianza de masa • Confianza de error de masa de fragmentos • Confianza tiempo de retención • Confianza de isótopos

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
	<ul style="list-style-type: none"> • Confianza biblioteca • Confianza de la fórmula • Reglas combinadas <p>Las señales cualitativas de confianza se pueden probar para los valores Verde, Amarillo, Rojo o Gris.</p>
IN	<p>Identifica si un elemento está en un conjunto de valores. Si el elemento está en el conjunto, se devuelve <code>true</code>. Si el elemento no está en el conjunto, se devuelve <code>false</code>.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>IN (<i>[Results Table column] number string function; value 1;value 2;value 3</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>columna de la tabla de resultados, número, cadena o función</i> se especifica para buscar una columna de la tabla de resultados, un número, una cadena de texto o una función. • <i>valor 1;valor 2;valor 3</i> es una lista de hasta 100 valores que hay que buscar en el conjunto. Los valores pueden ser números, texto o funciones. <p>Ejemplo: IN([Actual Concentration]; 1;2;3)</p>
INTERCEPT	<p>Obtiene el punto en el que el gráfico de una función o relación se interseca con el eje opuesto del sistema de coordenadas.</p> <p>Sintaxis:</p> <ul style="list-style-type: none"> • INTERCEPT (<i>[X-value]; [Y-value]</i>) • INTERCEPT (<i>[Y-value]</i>) <hr/> <p>Nota: Si solo se especifica un valor, se utiliza como <i>valor Y</i> y Concentración real se utiliza como <i>valor X</i>.</p> <hr/> <p>INTERCEPT se refiere a la regresión lineal ($y = ax + b$).</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
ISNUMBER	<p>Identifica un valor en una celda de la tabla de resultados como numérico o no numérico. Si el valor es un número, se devuelve <code>true</code>. Si el valor no es un número, se devuelve <code>false</code>.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>ISNUMBER ([Results Table column])</p> <p>Ejemplo¹²: ISNUMBER ([Calculated Concentration])</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Cuando se usa ISNUMBER en instrucciones complejas, como con una función IF, el resultado (<code>true</code> o <code>false</code>) debe estar en minúsculas y sin comillas.</p> <p>Ejemplo: IF (ISNUMBER ([Area]) = <code>true</code>; 'compound present'; 'compound not present')</p>
LEFT ^{13 14 15}	<p>Obtiene un número especificado de caracteres desde el inicio del texto.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>LEFT ([Results Table column];n)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> es el número de caracteres que hay que obtener. <p>Ejemplo: LEFT ([Sample ID];4)</p>
LOG	<p>Obtiene el logaritmo del valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>LOG (1;10)</p>

¹³ La función se puede usar con otras funciones.

¹⁴ La función se puede usar en columnas de números, de texto o booleanas.

¹⁵ Se recomienda usar la función en columnas de texto.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
LOG10	<p>Obtiene el logaritmo en base 10 del valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>LOG10 (1)</p>
MAD	(Desviación absoluta mediana) Obtiene una medida de la variabilidad de una muestra univariante de datos cuantitativos. La función MAD no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.
MAX	Obtiene el valor más alto en un conjunto.
MEAN	Obtiene la suma de una lista de números dividida entre la cantidad de números de la lista.
MEDIAN	El valor que divide la mitad superior de una muestra de datos, de una población o de una distribución de probabilidad, de la mitad inferior.
MIN	Obtiene el valor más pequeño en un conjunto.
POW	<p>Obtiene un número especificado elevado a la potencia especificada.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>POW (n1; n2)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n1</i> es el número que hay que elevar, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados, como una función o como un número. • <i>n2</i> es la potencia, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados, una función o un número. <p>Ejemplo: POW (2, 3)</p> <hr/> <p>Nota: Si el resultado es mayor que 1,7E + 308, se muestra N/A.</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
<p>RIGHT ^{13 14 15}</p>	<p>Obtiene el número especificado de caracteres desde el final del texto.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>RIGHT(<i>[Results Table Column]</i>; <i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> es el número de caracteres que hay que obtener. <p>Ejemplo: RIGHT (<i>[Barcode]</i>; 3)</p>
<p>ROUND ^{2 3}</p>	<p>Redondea el número en la columna especificada de la tabla de resultados, o el número especificado por el usuario, al entero más cercano o al número especificado de decimales.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>ROUND(<i>[Results Table column]</i>; <i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> es el número de decimales. • Si se especifica $n > 0$, el número se redondea al número de decimales especificado. • Si se especifica $n = 0$, el número se redondea al entero más cercano, es decir, no se usan decimales. • Si se especifica $n < 0$, el número se redondea a la izquierda del punto decimal. <p>Ejemplo: ROUND (<i>[Calculated Concentration]</i>; 0)</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
SEARCH ^{13 16 17}	<p>Obtiene la posición de los caracteres especificados en el texto de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>SEARCH('search string'; [Results Table column]);n)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>cadena de búsqueda</i> es el texto o el valor que hay que buscar. • <i>n</i> es la posición del carácter a partir del que se empieza a contar un segmento de texto. <p>SEARCH admite el uso de caracteres comodín. Consulte la tabla: Tabla A-2.</p>
SIGN	<p>Obtiene un valor que identifica el signo del valor de la columna de la tabla de resultados especificada o del número especificado. La función SIGN no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>SIGN(<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> es la potencia, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.

¹⁶ El texto que se usa en esta función no distingue entre minúsculas y mayúsculas.

¹⁷ Si la *cadena de búsqueda* especificada no se encuentra, el resultado está controlado por la opción seleccionada para **Tratar los valores de texto resultantes como**. Si **Tratar los valores de texto resultantes como** se establece en **Texto original**, la función obtiene **N/A**.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
SIN	<p>Obtiene el seno de un ángulo especificado como el valor de una columna de la tabla de resultados o como un número. La función SIN no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>SIN (<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> es el ángulo, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.
SLOPE	<p>Obtiene un número que identifica tanto la dirección como la pendiente de la línea. También se denomina <i>gradiente</i>.</p> <p>Sintaxis:</p> <ul style="list-style-type: none"> SLOPE ([<i>X-value</i>]; [<i>Y-value</i>]) SLOPE ([<i>Y-value</i>]) <hr/> <p>Nota: Si solo se especifica un valor, se utiliza como <i>valor Y</i> y Concentración real se utiliza como <i>valor X</i>.</p> <hr/> <p>SLOPE se refiere a la regresión lineal ($y = ax + b$).</p>
SQRT	<p>Obtiene la raíz cuadrada del valor de una columna de la tabla de resultados o del número especificado.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>SQRT (<i>n</i>)</p>
STDEV	<p>(Desviación estándar) Obtiene una medida que se emplea para cuantificar la cantidad de variación o dispersión de un conjunto de valores de datos.</p>

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
SUBSTITUTE ^{4 13}	<p>Crea una columna de la tabla de resultados que sustituye un valor alfanumérico por otro valor alfanumérico de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>SUBSTITUTE ([Results Table column]; 'original alphanumeric value'; 'new alphanumeric value'; n)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> (opcional) es la ocurrencia del <i>valor alfanumérico original</i> que se sustituirá por el <i>nuevo valor alfanumérico</i>. Si se especifica <i>n</i>, solo se sustituye la instancia <i>n.ª</i> del valor. En caso contrario, todas las instancias del valor anterior se cambian al nuevo valor. <p>Ejemplo: SUBSTITUTE ([Sample Name]; 'STD'; 'STD_00')</p>
SUM	Obtiene la suma de la lista de números de un conjunto.
TAN	<p>Obtiene la tangente de un ángulo que se puede especificar como el valor de una columna de la tabla de resultados o como un número. La función TAN no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>TAN (<i>n</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> es el ángulo, que se puede especificar como una columna de la tabla de resultados o como un número.

Tabla A-1: Funciones (continuación)

Función	Descripción
TEXT	<p>Aplica códigos de formato a un número para modificar cómo se muestra el número. La función se puede usar para mostrar números en un formato más legible o para usar números, texto y símbolos de forma conjunta. El formato se puede aplicar a columnas numéricas o de texto. El formato no se puede aplicar a columnas booleanas. La función TEXT no está disponible en la calculadora, pero se puede escribir.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>TEXT(<i>[Results Table Column]; 'format code'</i>)</p> <p>Donde:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>columna de la tabla de resultados</i> es la columna a la que se va a dar formato. • <i>código de formato</i> controla cómo se muestra el contenido de la columna. Consulte de la Tabla A-3 a la Tabla A-9.
TRIM ¹³	<p>Elimina los espacios sobrantes del texto. Se eliminan todos los espacios (salvo los que separan las palabras) situados al principio, al final o en medio del texto de una columna de la tabla de resultados estándar o personalizada.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>TRIM(<i>[Results Table column]</i>)</p> <p>Ejemplo: TRIM(<i>[Barcode]</i>)</p>
TRUNCATE	<p>Obtiene la parte entera de un número en una columna de la tabla de resultados.</p> <p>Sintaxis:</p> <p>TRUNCATE (<i>[Results Table column]</i>)</p>

Tabla A-2: Caracteres comodín

Carácter comodín	Descripción
?	<p>Un signo de interrogación (?) busca un solo carácter que puede ser cualquiera.</p> <p>Ejemplo: SEARCH('?ard';[Component Comment];1)</p> <p>?ard busca card en el texto <i>Test wild card characters (?)</i> y (*). Devuelve la posición 11.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Para buscar un signo de interrogación (?), escriba una barra invertida (\) antes del carácter.</p> <p>Ejemplo: SEARCH('\\?';[Component Comment];1)</p> <p>\\? busca ? en el texto <i>Test wild card characters (?)</i> y (*). Devuelve la posición 28.</p> <hr/>
*	<p>Un asterisco (*) busca cualquier secuencia de caracteres.</p> <p>Ejemplo: SEARCH('*ard';[Component Comment];1)</p> <p>*ard busca Test wild card en el texto <i>Test wild card characters (?)</i> y (*). Devuelve la posición 1.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Para buscar un asterisco (*), escriba una barra invertida (\) antes del carácter.</p> <p>Ejemplo: SEARCH('*';[Component Comment];1)</p> <p>* busca* en el texto <i>Test wild card characters (?)</i> y (*). Devuelve la posición 36.</p> <hr/>

Códigos de formato

Tabla A-3: Año

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
De 00 a 99	yy	TEXT ([Results Table Column];'yy')	23

Referencia de fórmulas

Tabla A-3: Año (continuación)

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
De 1900 a 9999	YYYY	TEXT ([Results Table Column]; 'yyyy')	2023

Tabla A-4: Mes

Formato	Código de formato ¹⁸	Sintaxis	Resultado de ejemplo
1 a 12	M	TEXT ([Results Table Column]; 'M')	9
De 01 a 12	MM	TEXT ([Results Table Column]; 'MM')	09
De ene a dic	MMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMM')	Sep
De enero a diciembre	MMMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMMM')	Septiembre

Tabla A-5: Día

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
1 a 31	d	TEXT ([Results Table Column]; 'd')	4
De 01 a 31	dd	TEXT ([Results Table Column]; 'dd')	04
De dom a sáb	ddd	TEXT ([Results Table Column]; 'ddd')	Lun
De domingo a sábado	dddd	TEXT ([Results Table Column]; 'dddd')	Lunes

Tabla A-6: Horas

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
De 0 a 12 (formato de 12 horas)	h	TEXT ([Results Table Column]; 'h')	9

¹⁸ El código de formato distingue entre mayúsculas y minúsculas. Se usa una *m* minúscula para dar formato a los minutos.

Tabla A-6: Horas (continuación)

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
De 01 a 12 (formato de 12 horas)	hh	TEXT ([Results Table Column]; 'hh')	09
AM o PM (formato de 12 horas)	AM/PM	TEXT ([Results Table Column]; 'h AM/PM')	9 PM
De 0 a 24 (formato de 24 horas)	H	TEXT ([Results Table Column]; 'H')	21
De 00 a 24 (formato de 24 horas)	hh	TEXT ([Results Table Column]; 'HH')	09

Tabla A-7: Minutos

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
0 a 59	m	TEXT ([Results Table Column]; 'm')	7
De 00 a 59	mm	TEXT ([Results Table Column]; mm)	07

Tabla A-8: Segundos

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
0 a 59	s	TEXT ([Results Table Column]; 's')	2
De 00 a 59	ss	TEXT ([Results Table Column]; ss)	02

Referencia de fórmulas

Tabla A-9: Números

Formato	Código de formato	Sintaxis	Resultado de ejemplo
Decimales	Separador de decimales seguido de un 0 para cada decimal necesario	TEXT ([Results Table Column]; '#.00')	.24
Cero en el lugar de las unidades para números menores que uno	0 en el lugar de las unidades	TEXT ([Results Table Column]; '0.000')	0.245
Porcentaje	%	TEXT ([Results Table Column]; '0%')	24%
Separador de miles	# o 0 para cada dígito hasta el lugar de los millares, con el separador necesario en la posición correcta	TEXT ([Results Table Column]; '#,###')	12,200,000
Notación científica	E+0	TEXT ([Results Table Column]; '0.0E+0')	1.2E+7

Contacto

Formación del cliente

- En América del Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fuera de la UE y América del Norte, visite sciex.com/education para obtener información de contacto.

Centro de aprendizaje en línea

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Asistencia técnica de SCIEX

SCIEX y sus representantes cuentan con un equipo de especialistas técnicos y de servicio totalmente cualificados en todo el mundo. Ellos sabrán resolver sus dudas sobre el sistema y cualquier problema técnico que pueda surgir. Para obtener más información, vaya al sitio web de SCIEX en sciex.com o use uno de los siguientes enlaces para ponerse en contacto con nosotros.

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

Ciberseguridad

Para obtener las indicaciones sobre ciberseguridad más recientes para los productos SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentación

Esta versión del documento sustituye a todas las versiones anteriores de este documento.

Para ver este documento por medios electrónicos, se necesita Adobe Acrobat Reader. Para descargar la última versión, vaya a <https://get.adobe.com/reader>.

Para buscar la documentación relacionada con el producto de software, consulte las notas de la versión o la guía de instalación del software que se suministra con el software.

Para localizar la documentación relacionada con los productos de hardware, consulte la documentación que se suministra con el sistema o componente.

Las últimas versiones del documento están disponibles en el sitio web de SCIEX, en sciex.com/customer-documents.

Contacto

Nota: Para solicitar una versión impresa y gratuita de este documento, póngase en contacto con sciex.com/contact-us.
