

Guia de recursos

Software SCIEX OS

Colunas calculadas



Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou de qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir que o software seja desmontado, passe por engenharia reversa ou descompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou a seus produtos, podendo conter peças cujos nomes estejam registrados como marcas registradas e/ou funcionem como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto, seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou da licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A Sciex não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

Produto destinado apenas para pesquisa científica. Não destinado ao uso em procedimentos diagnósticos.

As marcas comerciais e/ou marcas registradas mencionadas neste documento, incluindo as logos associadas, são de propriedade da AB Sciex Pte. Ltd., ou de seus respectivos proprietários, nos Estados Unidos e/ou em outros países.

AB Sciex™ está sendo usada sob licença.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Índice

Capítulo 1: Visão geral	4
Capítulo 2: Fórmulas	5
Editor de fórmula.....	5
Aritmética simples.....	7
Funções mais complexas.....	8
Função IF	9
Operadores.....	10
A opção Tratar valores do texto resultante como	11
Extração simples de informações não padrão.....	12
Exemplos: fórmulas.....	14
Funções GET.....	14
Funções agregadas.....	25
Funções numéricas.....	27
Funções de texto.....	30
Função IF	35
Capítulo 3: Pesquisa condicional	41
Editor de pesquisa condicional.....	41
Exemplos: pesquisa condicional.....	44
Apêndice A: Referência de fórmula	54
Entre em contato conosco	77
Treinamento do consumidor.....	77
Centro de aprendizagem online.....	77
Suporte da SCIEX.....	77
Segurança cibernética.....	77
Documentação.....	77

Colunas calculadas são colunas criadas com uma tabela de pesquisa condicional ou fórmula. Colunas calculadas são criadas em um método de processamento.

Durante o processamento, tabelas de pesquisa condicional e fórmulas são aplicadas, e os resultados são mostrados em colunas personalizadas na tabela de resultados.

Nota: Se uma coluna calculada criada em uma versão anterior do SCIE X OS estiver em uso, revise os resultados para verificar se estão corretos.

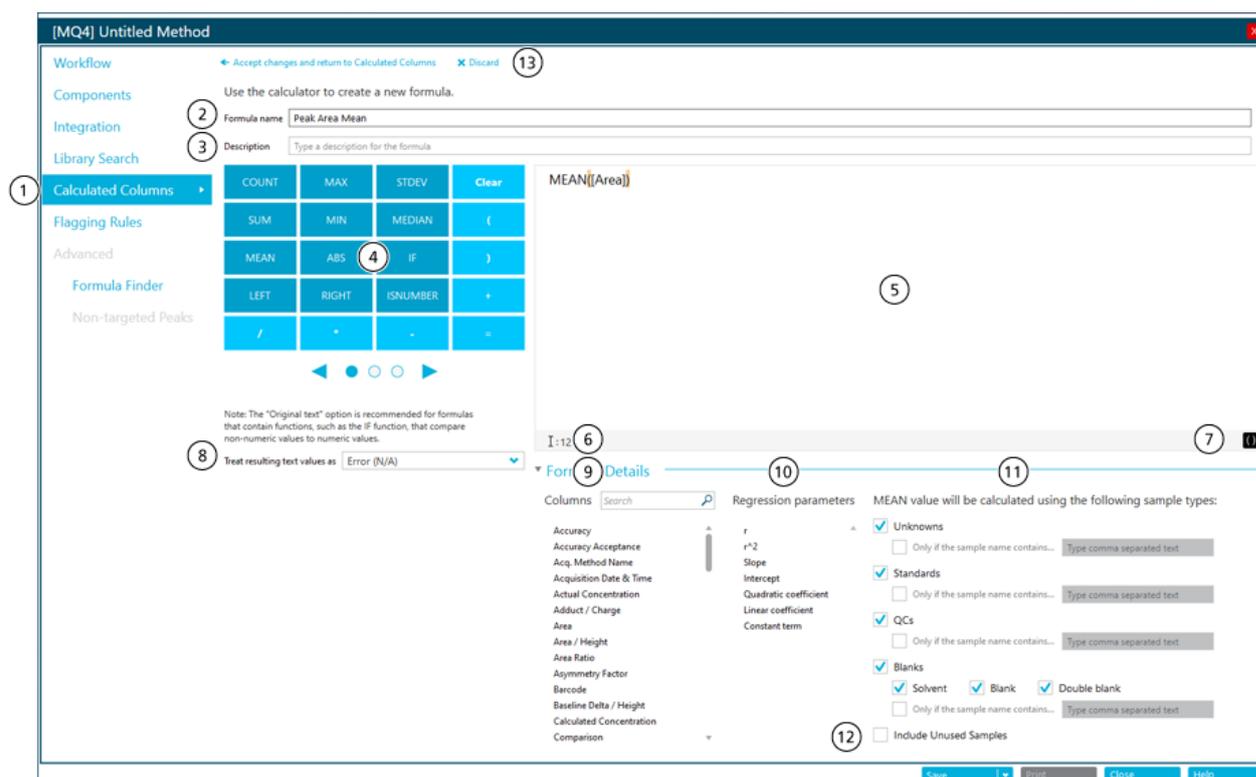
Esse documento mostra como usar o recurso de colunas calculadas.

Nota: As fórmulas podem ser importadas e exportadas como arquivos `frm1` para uso ou compartilhamento futuro.

Editor de fórmula

A figura a seguir mostra a interface para o editor de fórmula.

Figura 2-1: Página Formula



Item	Descrição
1	A etapa Colunas calculadas no fluxo de trabalho do método de processamento. Clique para abrir a página Colunas calculadas e clique em Adicionar > Fórmula .

Fórmulas

Item	Descrição
2	<p>O campo Nome da fórmula. Digite um nome para a fórmula.</p> <hr/> <p>Nota: O nome da fórmula não pode conter colchetes nem parênteses e não deve ser igual ao nome de uma função.</p> <hr/> <p>Nota: Após usar uma fórmula em uma regra de alerta ou em outra fórmula, não será possível mudar o nome da fórmula.</p> <hr/> <p>Dica! Após o processamento, a fórmula será adicionada como uma coluna na tabela de resultados. O cabeçalho da coluna é o nome da fórmula. Para aproveitar mais o espaço na tela, recomendamos usar nomes de fórmula curtos. É possível incluir informações detalhadas no campo Descrição.</p> <hr/> <p>Dica! Para um cálculo com mais de uma fórmula, use prefixos e números significativos para identificar a sequência de uso das fórmulas.</p>
3	<p>O campo Descrição. A descrição será mostrada na página Colunas calculadas.</p> <hr/> <p>Dica! Se possível, inclua a fórmula na Descrição. Não será necessário que o usuário abra a fórmula para ver o conteúdo.</p>
4	<p>Uma calculadora que contém funções e operadores normalmente usados. Consulte as seções: Referência de fórmula e Operadores.</p>
5	<p>O campo Fórmula. Digite ou selecione as funções, operadores, colunas e valores que serão usados nas fórmulas.</p>
6	<p>Seção de validação. Se o campo Fórmula incluir erros, uma mensagem de erro será mostrada nesta seção. A mensagem identifica a posição onde ocorreu o erro. Por exemplo, se o usuário inserir esta fórmula:</p> <pre>IFS([Sample Type] == 'Standard'; 'Yes'; 'No')</pre> <p>esta mensagem de erro seria mostrada:</p> <pre>The Formula contains an invalid function at position 1: IFS.</pre>
7	<p>Uma opção para aplicar realce a parênteses no campo Fórmula.</p>

Item	Descrição
8	Conjunto de opções que controlam as ações em entradas de texto. O campo Tratar valores do texto resultante como é importante nas colunas da tabela de resultados que incluem saídas numéricas e de texto, como N/A, degenerate, <0, <0, >0, not enough points, less than <i>n</i> points e o símbolo de infinito. Para obter mais informações, consulte a seção: A opção Tratar valores do texto resultante como
9	Colunas disponíveis da tabela de resultados. Clique em uma coluna para adicioná-la ao campo da fórmula.
10	Parâmetros de regressão disponíveis. Clique em um parâmetro para adicioná-lo ao campo da fórmula. Nota: Parâmetros de regressão só são exibidos no painel Curva de calibração. Eles não são incluídos como colunas na tabela de resultados. Nota: Os parâmetros de regressão só são compatíveis com colunas calculadas para tipos de regressão linear, linear até zero, quadrática e quadrática até zero. Eles não são compatíveis com os tipos de regressão Energia , Wagner , Hill nem Fator de resposta médio .
11	Tipos de amostra disponíveis. Selecione os tipos de amostra de operação da função. Nota: Esta seção é mostrada para funções agregadas, ou seja, funções que operam em várias linhas.
12	Opção para incluir amostras com a caixa de seleção Uso desmarcada. Nota: Esta seção será exibida para funções agregadas. Por padrão, somente as linhas com a caixa de seleção Uso marcada serão incluídas em cálculos que usam funções agregadas.
13	Opções para salvar ou descartar a fórmula.

Aritmética simples

Fórmulas simples podem ser criadas para fazer operações matemáticas básicas.

Exemplo: R^2

[r] * [r]

Fórmulas

Neste exemplo, o operador de multiplicação (*) é usado para multiplicar o valor R por si mesmo para calcular o valor R².

Exemplo: pontos por segundo coletados

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

Nesse exemplo, os pontos na linha de base são divididos pelos segundos do início ao fim de um pico cromatográfico integrado. Essa fórmula usa os operadores de divisão (/), multiplicação (*) e subtração (-).

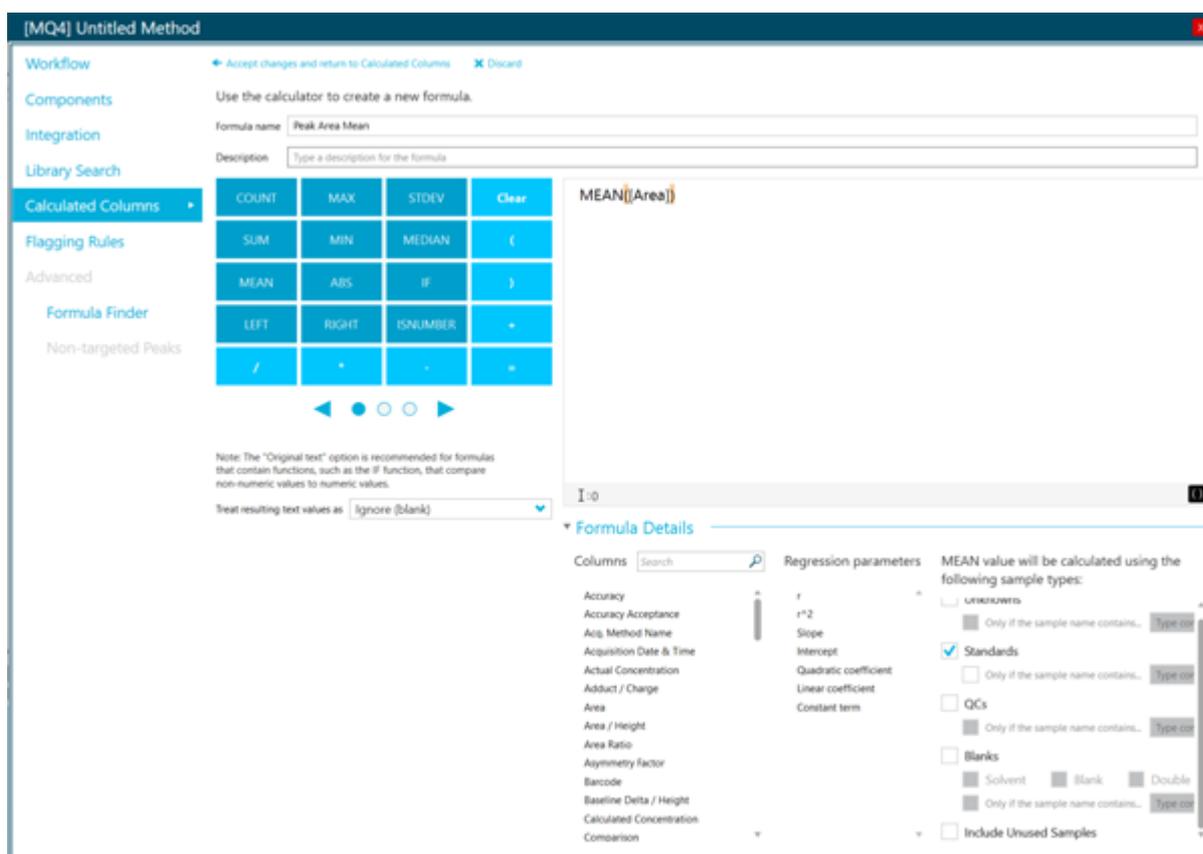
Funções mais complexas

Muitas outras funções e estruturas de controle estão disponíveis. Algumas funções comuns, como **MEAN**, **MAX** e **MIN**, são mostradas na calculadora na barra de fórmula. Para ver uma lista completa de detalhes, operadores e funções de sintaxe, pressione **F1** na página do editor de fórmulas.

Exemplo: MEAN([Area]) para Padrões

Ao usar uma função que opera em todos os valores, o usuário pode selecionar as amostras que serão incluídas no cálculo.

Figura 2-2: Obter a média somente da área de pico de amostras padrão



Exemplo: combinar funções

É possível combinar aritmética simples e funções mais complexas. Por exemplo, para calcular os pontos médios por segundo coletado, use a fórmula a seguir:

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

Nota: A combinação de funções agregadas não é recomendada. Crie uma coluna separada para cada função agregada. Em seguida, crie uma fórmula que use essas colunas.

Função IF

A função **IF** realiza um teste lógico e fornece um resultado `true` ou `false`. Use as funções **IF** aninhadas para testar mais de uma condição. A função **IF** pode ser usada com outras funções lógicas, como **e** e **ou**, para ampliar um teste lógico.

A sintaxe básica da declaração **IF** é a seguinte:

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

Em que:

- *condition* é um valor ou expressão lógica que podem ser considerados verdadeiros ou falsos.
- *value if true* é um valor a ser mostrado na coluna relacionada da tabela de resultados quando *condition* for verdadeira.
- *value if false* é um valor a ser mostrado na coluna relacionada da tabela de resultados quando *condition* for falso.

Nota: Os caracteres **&&** e **||** podem ser usados para **e** e **ou**, respectivamente. Os operadores **e** e **ou** precisam estar entre espaços, mas os operadores **&&** e **||**, não.

Nota: O símbolo da função **IF** pode ser selecionado na calculadora, digitado ou copiado de outra fonte. A função **IF** não diferencia maiúsculas de minúsculas.

Nota: Nas declarações **IF** com mais de uma *<condition>*, se o usuário não avalia nem uma *<condition>*, então uma saída *<value if false>* É mostrada na coluna personalizada na Tabela de resultados.

A função **IF** também permite que outras funções numéricas, como **Média** e **STDEV**, também sejam usadas na fórmula, nas expressões *condition*, *value if true*, ou *value if false*. .

Fórmulas

condition

Alguns exemplos de uma *condition* incluem:

```
[Area]>5000
```

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

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

value if true e value if false

As *value if true* e *value if false* podem ser numéricas ou de texto.

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

Nota: As quebras de linha não são válidas em fórmulas. Se uma fórmula de exemplo for colada no campo de fórmulas, remova as quebras de linha.

Operadores

Tabela 2-1: Operadores (incluídos na calculadora)

Operador	Descrição
/	Divide o valor antes do operador pelo valor depois do operador.
*	Multiplica o valor antes do operador pelo valor depois do operador.
-	Subtrai o valor antes do operador do valor depois do operador.
=	Mostra o resultado da função.
+	Adiciona o valor antes do operador ao valor depois do operador.
()	Especifica a ordem de operação. Coloca os cálculos a serem feitos primeiro entre parênteses.

Tabela 2-2: Operadores lógicos e de comparação (podem ser digitados manualmente)

Operador	Descrição
<	Se o valor antes do operador for menor que o valor depois do operador, o resultado será <code>true</code> . Caso contrário, o resultado será <code>false</code> .
<=	Se o valor antes do operador for menor ou igual ao valor depois do operador, o resultado será <code>true</code> . Caso contrário, o resultado será <code>false</code> .

Tabela 2-2: Operadores lógicos e de comparação (podem ser digitados manualmente) (continuação)

Operador	Descrição
>	Se o valor antes do operador for maior que o valor depois do operador, o resultado será <code>true</code> . Caso contrário, o resultado será <code>false</code> .
>=	Se o valor antes do operador for maior ou igual ao valor depois do operador, o resultado será <code>true</code> . Caso contrário, o resultado será <code>false</code> .
!=	Se o valor antes do operador não for igual ao valor seguinte, o resultado será <code>true</code> . Caso contrário, o resultado será <code>false</code> .
&&	Se as expressões antes e depois do operador forem verdadeiras, o resultado será <code>true</code> . Se uma ou ambas as expressões forem falsas, o resultado será <code>false</code> . Representação em caracteres do operador booleano e . && , e ou ambos podem ser usados em fórmulas.
	Se a expressão antes ou depois do operador for verdadeira, o resultado será <code>true</code> . Se ambas as expressões forem falsas, o resultado será <code>false</code> . Representação em caracteres do operador booleano ou . , ou ou ambos podem ser usados em fórmulas.
<code>true</code>	Para colunas que contenham caixas de seleção, identifica colunas para as quais a caixa de seleção foi marcada. Exemplo ¹ : <code>IF([Sample Type] = 'Standard'&&[Used] = true&&[Reportable] = true; 'Qualified STD reported'; '')</code>
<code>false</code>	Para colunas que contenham caixas de seleção, identifica colunas para as quais a caixa de seleção foi desmarcada.

A opção Tratar valores do texto resultante como

A opção **Tratar valores do texto resultante como** controla como o texto é interpretado em uma coluna personalizada da tabela de resultados que inclua texto ou uma combinação de números e texto. Por exemplo, a coluna **Tipo da amostra** contém somente texto, a coluna **Massa precursora** contém somente valores numéricos, e a coluna **Concentração calculada** pode conter valores numéricos e texto.

Para cada fórmula, o usuário pode definir a opção **Tratar valores do texto resultante como** como o valor aplicável às funções usadas nessa fórmula. Os seguintes valores estão disponíveis:

¹ As quebras de linha não são válidas em fórmulas. Se uma fórmula for colada no campo de fórmulas, remova as quebras de linha.

Fórmulas

- **Zero**
- **Ignorar (em branco)**
- **Erro (N/A)**
- **Texto original**

Nota: Para obter mais informações sobre essas opções, consulte o documento: Sistema de ajuda do .

Se os cálculos forem realizados usando as funções a seguir, as opções recomendadas são **Zero**, **Ignorar (em branco)** ou **Erro (N/A)**: **CONTAGEM**, **MAX**, **STDEV**, **SUM**, **MIN**, **MEDIAN**, **GET**, **GETGROUP**, **SLOPE**, **INTERCEPT**, **MAD**, **GETSTAT**, **GETSAMPLECLOSEST**, **GETSAMPLECLOSESTHIGH**, **GETSAMPLECLOSESTLOW** ou **GETSAMPLEEQUAL**. Essas opções também são recomendadas nas declarações **IF** quando a fórmula contém colunas que podem ter valores numéricos.

A opção recomendada para a concatenação de valores de texto é **Texto original**.

Exemplo

Este exemplo concatena duas colunas que contêm valores de texto. Neste caso, a opção **Texto original** é recomendada.

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

Esta fórmula adiciona uma coluna de resumo que contém o nome da amostra e seu tipo. Por exemplo, se o nome da amostra for *Calibrator 1* e o tipo *Standard*, a coluna calculada incluirá *Calibrator 1 Standard*. Para esta fórmula, **Tratar valores do texto resultante como está** definido como **Texto original**.

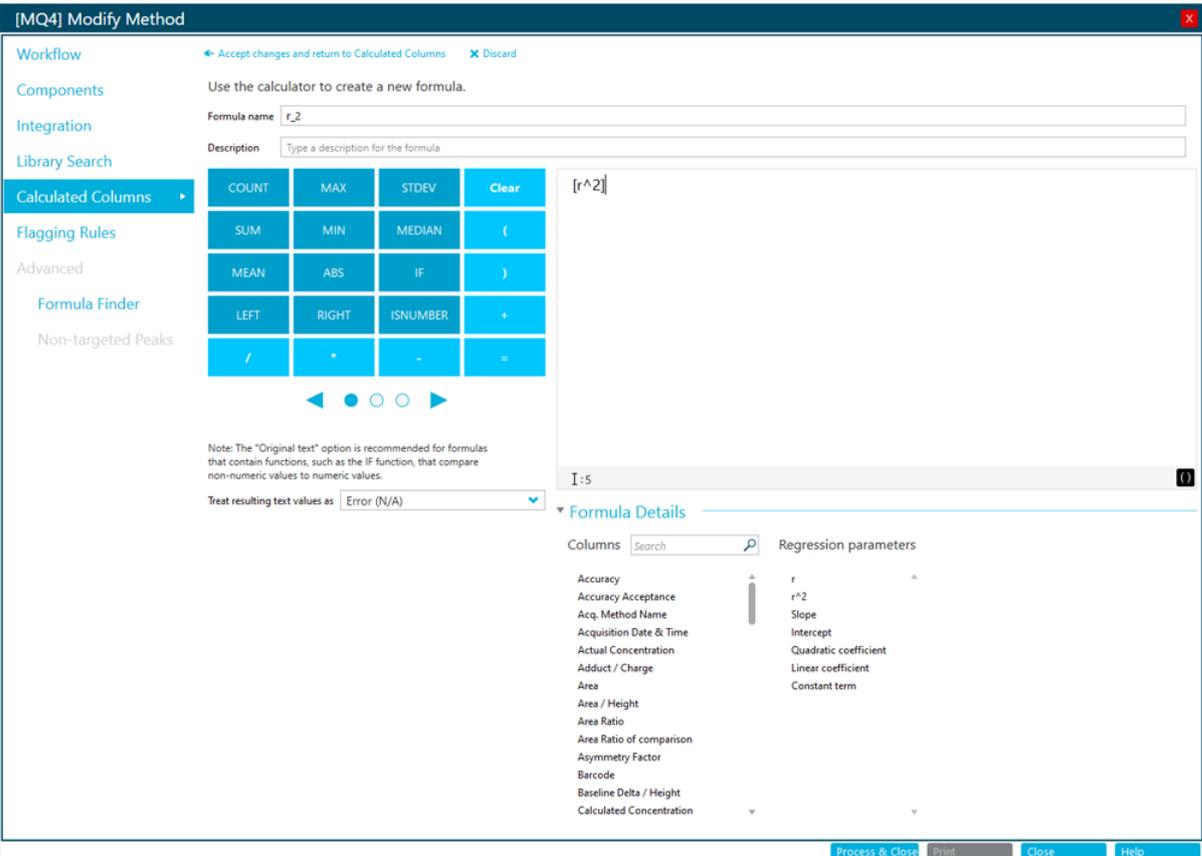
' ' adiciona um espaço.

Extração simples de informações não padrão

O recurso de colunas calculadas permite que os usuários mostrem informações que não estão disponíveis por padrão na tabela de resultados.

Por exemplo, para mostrar R^2 como uma coluna na tabela de resultados, clique em R^2 na lista **Parâmetros de regressão**.

Figura 2-3: Criar uma coluna personalizada com colunas calculadas



[MQ4] Modify Method

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

Components

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

Use the calculator to create a new formula.

Formula name:

Description:

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

◀ ● ○ ○ ▶

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

Treat resulting text values as:

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
- r²
- Slope
- Intercept
- Quadratic coefficient
- Linear coefficient
- Constant term

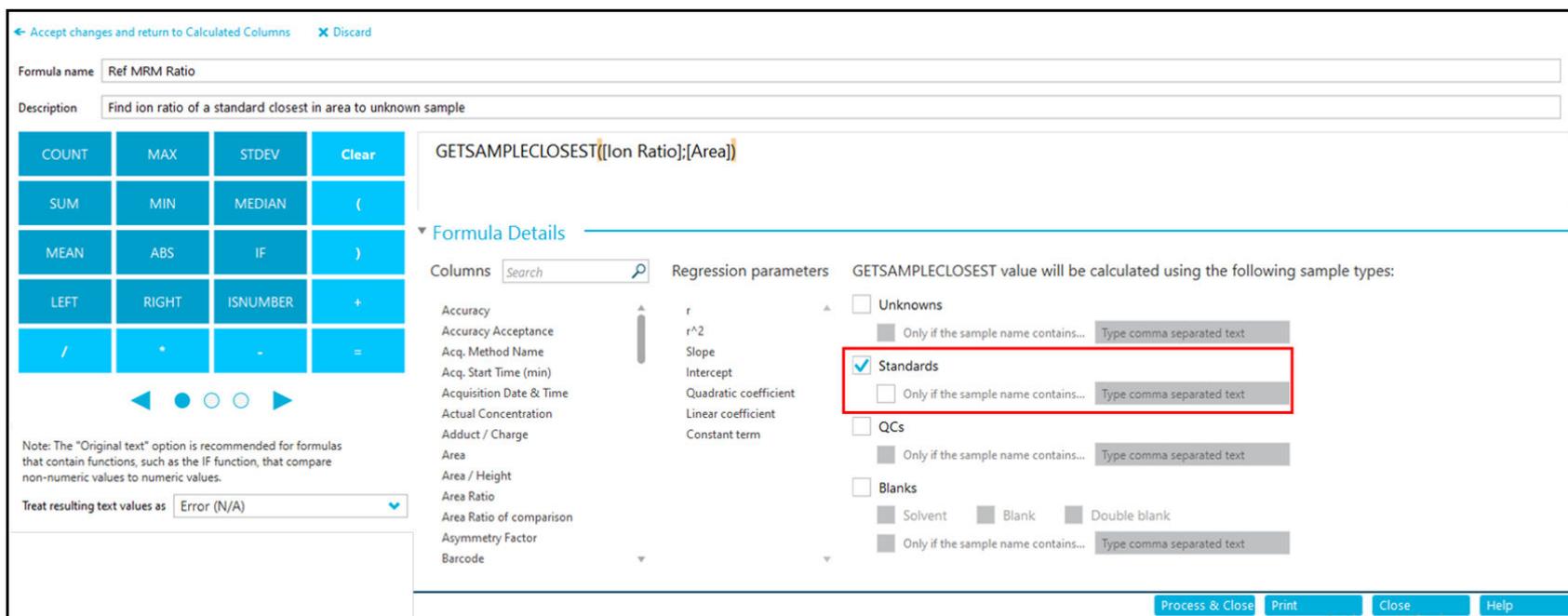
Process & Close Print Close Help

Exemplos: fórmulas

Funções GET

Encontre a proporção de íons do padrão mais próximo em área à amostra desconhecida (GETSAMPLECLOSEST)

Figura 2-4: Fórmula: Ref MRM Ratio



Nota: A tabela a seguir fornece um resumo das configurações mostradas na figura anterior.

Tabela 2-3: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Ref MRM Ratio	<code>GETSAMPLECLOSEST([Ion Ratio];[Area])</code>	A proporção de íons do padrão com a área mais próxima em relação às outras amostras. Consulte a coluna 1 na figura: Figura 2-5 .	Padrões	Erro (N/A)	Não

Fórmulas

Figura 2-5: Tabela de resultados: colunas calculadas com 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 e GETSAMPLEEQUAL

Tabela 2-4: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
High Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio];[Area])	A proporção de íons do padrão mais próximo que tenha uma área maior ou igual à área da amostra desconhecida. Consulte a coluna 2 na figura: Figura 2-5 .	Padrões	Erro (N/A)	Não
Low Ref MRM Ratio	GETSAMPLECLOSESTLOW ([Ion Ratio];[Area])	A proporção de íons do padrão mais próximo que tenha uma área menor ou igual à área da amostra desconhecida. Consulte a coluna 3 na figura: Figura 2-5 .	Padrões	Erro (N/A)	Não
Equal Ref MRM Ratio	GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio];[Area])	O resultado de GETSAMPLEEQUAL somente para padrões. Consulte a coluna 4 na figura: Figura 2-5 .	Padrões	Erro (N/A)	Não

Fórmulas

Comparar a área de duas amostras consecutivas: **GETVALUE** para análise de recuperação e transferência

Tabela 2-5: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Previous SampleIndex	[Sample Index]-1	O índice da amostra anterior na tabela de resultados.	N/A	Erro (N/A)	N/A
Previous SampleArea	GETVALUE ([Area]; [PreviousSampleIndex]; [Sample Index])	As áreas dos componentes na amostra adquiridos antes deste.	Padrões	Erro (N/A)	Não

Figura 2-6: Tabela 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 duas transições para uma só linha: **GETGROUP**

Tabela 2-6: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
GET Ametryn Group CalcConc	GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 1')+ GET ([Calculated Concentration]; 'Ametryn 2')	A concentração total calculada para ametrina 1 e ametrina 2.	Desconhecidos	Erro (N/A)	Não
GETGROUP Qual CalcConc	GETGROUP ([Calculated Concentration]; 2)	A concentração calculada da segunda transição no grupo.	Desconhecidos	Erro (N/A)	Não

Figura 2-7: Tabela de resultados: GET Ametryn Group CalcConc e 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

Disponibilizar valores estatísticos para alertas e relatórios: GETSTAT

Tabela 2-7: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
CV%STD	<code>GETSTAT('Percent CV'; 'Calculated Concentration')</code>	O valor de CV percentual de Concentração calculada da tabela de estatísticas para padrões e controles de qualidade.	N/A	Erro (N/A)	N/A
Av_RT_Prefix	<code>GETSTAT('MEAN'; 'Retention Time'; 'Sample Name Prefix')</code>	O valor médio de Tempo de retenção para amostras agrupadas por Prefixo do nome da amostra .	Padrões	Erro (N/A)	Não

Figura 2-8: Tabela 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: Tabela 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

Funções agregadas

Funções agregadas são funções que operam em várias linhas. Por exemplo, a função **MIN** encontra o menor valor em uma coluna em todas as linhas da tabela de resultados. A função **MEAN** calcula o valor médio de uma coluna.

Tabela 2-8: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
STD COUNT Area	COUNT ([Area])	O número de valores de área encontrados em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD MAX Area	MAX ([Area])	O valor mais alto de área encontrado em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD MEAN Area	MEAN ([Area])	O valor médio de área em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD MEDIAN Area	MEDIAN ([Area])	O valor da mediana de área em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD MIN Area	MIN ([Area])	O valor mínimo de área em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD STDEV Area	STDEV ([Area])	O desvio padrão do valor de área em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não
STD SUM Area	SUM ([Area])	O valor total de todos os valores de área em amostras padrão	Padrões	Ignorar	Não

Fórmulas

Figura 2-10: Tabela de resultados: funções 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

Funções numéricas

Tabela 2-9: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Rounded Calc. Conc	ROUND([Calculated Concentration];3)	Concentração calculada arredondado para 3 casas decimais.	N/A	Erro (N/A)	N/A
Calc. Conc Ceiling	CEILING([Calculated Concentration])	O menor número inteiro maior que (ou igual a) Concentração calculada .	N/A	Erro (N/A)	N/A
Calc. Conc Floor	FLOOR([Calculated Concentration])	O maior número inteiro menor que (ou igual a) Concentração calculada .	N/A	Erro (N/A)	N/A

Fórmulas

Figura 2-11: Tabela de resultados: funções 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: Neste exemplo, a função **ROUND** usa três casas decimais, como mostra a fórmula: **ROUND** ([Concentração calculada] ; 3) . A função **CEILING** obtém o menor número inteiro maior ou igual a **Concentração calculada**. O valor é configurado como uma casa decimal na caixa de diálogo Configurações de exibição da tabela de resultados. A função **FLOOR** obtém o maior número inteiro menor ou igual a **Concentração calculada**. O valor é configurado como zero casas decimais na caixa de diálogo Configurações de exibição da tabela de resultados.

Formato de número

Tabela 2-10: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não 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];'#,###'))	Concentração calculada formatado conforme aplicável aos limites do resultado.	N/A	Erro (N/A)	N/A

Fórmulas

Funções de texto

Use a concentração calculada para identificar picos que precisem de revisão: ISNUMBER

Tabela 2-11: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Calc. Conc. Review	<code>ISNUMBER([Calculated Concentration])</code>	<i>true</i> se Concentração calculada incluir um número. Caso contrário, <i>false</i> .	N/A	Erro (N/A)	N/A
Review Peak	<code>ISNUMBER([Calc. Conc. Review]= true; [Area]; 'Review Needed')</code>	Se a concentração calculada for um número, será a área. Se a concentração calculada for texto, "Review Needed".	N/A	Erro (N/A)	N/A

Figura 2-12: Results Table: Calc. Conc. Review e 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

Extrair informações das colunas Sample ID e Barcode: LEFT, TRIM e RIGHT

Tabela 2-12: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Assay	LEFT ([Sample ID];4)	Os quatro primeiros caracteres (letras ou números) de ID da amostra .	N/A	Erro (N/A)	N/A
Barcode Trim	TRIM ([Barcode])	Os conteúdos da coluna Código de barras com todos os espaços removidos.	N/A	Erro (N/A)	N/A
Req #	RIGHT ([Barcode Trim];8)	Os oito últimos caracteres de Barcode Trim.	N/A	Erro (N/A)	N/A

Figura 2-13: Tabela de resultados: colunas calculadas com funções LEFT, TRIM e 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

Item	Descrição
1	Os quatro primeiros caracteres da coluna ID da amostra .
2	Todos os espaços iniciais, finais e internos, exceto os espaços únicos entre segmentos, removidos da coluna Código de barras .

Fórmulas

Item	Descrição
3	Os oito últimos caracteres da coluna Sample ID.

Nota: O uso das funções **LEFT** e **RIGHT** não é recomendado em colunas numéricas. A **Precisão de formato do número** dos valores numéricos aplicados na caixa de diálogo Configurações de exibição da tabela de resultados não será incluída no cálculo. Essas funções operam no valor subjacente integral.

Formato de texto

Tabela 2-13: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Formato de data 1	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'yyyy-MMMM-dd')	2022-May-04	N/A	Erro (N/A)	N/A
Formato de data 2	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'MM/dd/yyyy')	05/04/2022	N/A	Erro (N/A)	N/A
Formato de data 3	TEXT([Acquisition Date & Time]; 'dddd MMM dd, yyyy')	Wednesday May 04, 2022	N/A	Erro (N/A)	N/A

Função IF

Usar a área média de padrões internos para executar um teste do desempenho padrão interno

O valor médio da área padrão interna (IS) é calculado nas amostras aplicáveis e comparado a um valor de 1e6. Se **MÉDIA ([área IS])** for maior que 1e6, ou seja, se *condition* for verdadeira, o valor médio da área IS será mostrado na coluna da tabela de resultados relacionada. Se **MÉDIA ([área IS])** for menor que 1e6, ou seja, se *condition* for falsa, **Revisar desempenho de IS** será mostrado.

Tabela 2-14: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
IS Performance	IF (MEAN ([IS Area])>=1e6; MEAN ([IS Area]);'Review IS performance')	Se verdadeiro, mostra a área média IS. Se falso, mostra o texto Revisar desempenho de IS .	N/A	Erro (N/A)	N/A

Fórmulas

Verificar se o tempo de retenção do analito na amostra desconhecida é igual ao do padrão de calibração, com tolerância de $\pm 0,1$ minutos

Tabela 2-15: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
RT_Check	IF ([Sample Type]='Unknown'; IF (ABS (MEAN ([Retention Time]- [Retention Time])<=0.1; 'RT Pass'; 'RT Fail'); 'N/A')	Se a diferença entre o tempo de retenção da amostra e o do padrão for maior que 0,1, RT Fail. Se for menor, RT Pass. Se a amostra não for desconhecida, N/A.	Padrões	Erro (N/A)	Não
STD Mean RT	MEAN ([Retention Time])	O tempo de retenção médio de todas as amostras padrão.	Padrões	Ignorar	Não
RT delta	ABS ([STD Mean RT]- [Retention Time])	O valor absoluto da diferença entre o tempo de retenção médio e o tempo de retenção da amostra.	Todos	Erro (N/A)	Não
Check RT delta	IF ([RT delta]>0.1; 'RT Fail'; 'RT Pass')	Se a diferença entre o tempo de retenção da amostra e o da amostra desconhecida for maior que 0,1, RT Fail. Se for menor, RT Pass.	N/A	Erro (N/A)	Não

Tabela 2-15: Configurações (continuação)

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
Check RT Unknowns	IF ([Sample Type]='Unknown'; [Check RT delta]; 'N/A')	As amostras desconhecidas no resultado de Check RT delta	N/A	Erro (N/A)	Não

Fórmulas

Figura 2-14: Tabela 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

Usar o semáforo de Confiança da proporção de íons para identificar picos que exigem revisão

A função **IF** pode ser usada para executar um teste das colunas que contêm um semáforo. O semáforo pode ter estes valores: *Red*, *Yellow*, *Greene Grey*.

Tabela 2-16: Configurações

Nome	Fórmula	Resultado	Tipos de amostra	Tratar valores do texto resultante como	Incluir amostras não utilizadas
MRM Ratio Fails	<code>IF([Ion Ratio Confidence]='Red' [Ion Ratio Confidence]='Yellow' [Ion Ratio Confidence]='Grey'; 'Needs Revision'; 'Pass')</code>	Se Confiança da proporção de íons for vermelho, amarelo ou cinza, Needs Revision. Caso contrário, Pass.	N/A	Erro (N/A)	N/A

Fórmulas

Figura 2-15: Tabela 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

Pesquisa condicional

3

Uma coluna de pesquisa condicional contém um valor controlado pelo valor de outra coluna, especificado em uma entrada da tabela de pesquisa condicional.

As entradas na tabela de pesquisa condicional contêm estas informações:

- Uma coluna personalizada ou padrão da tabela de resultados
- Uma condição, por exemplo, **Equals**
- Um valor de pesquisa
- O valor de saída a ser mostrado na coluna de pesquisa condicional na tabela de resultados

Se a coluna de pesquisa usar várias condições, as condições serão usadas com o operador booleano AND (e não OR). Se a combinação de condições for falsa, ou seja, não tiver resultados, o valor do campo **Saída padrão** será usado.

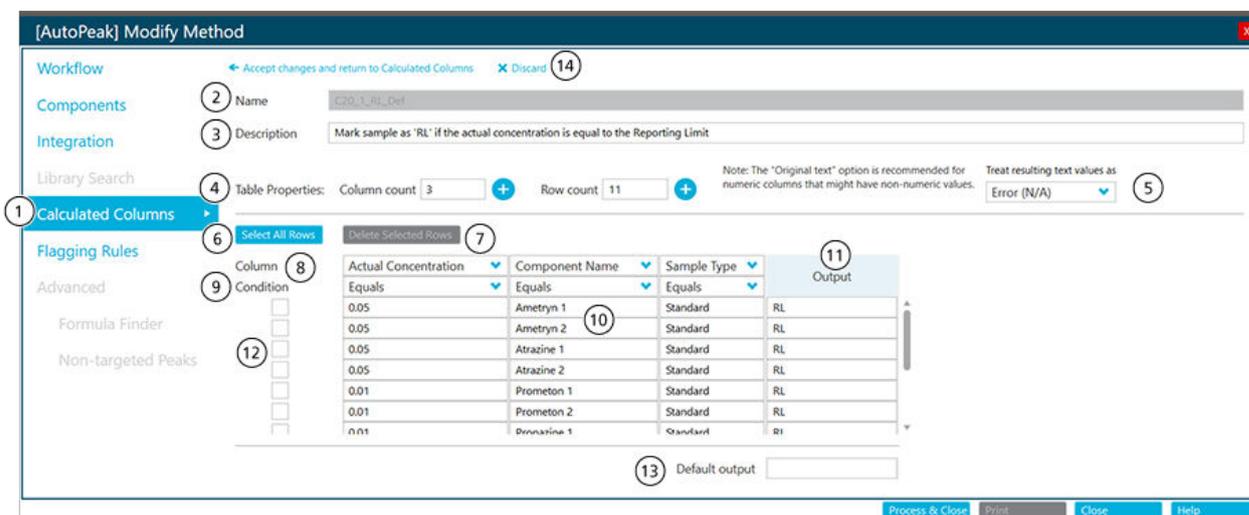
Durante o processamento, uma coluna da tabela de resultados será criada para cada pesquisa condicional. Se pelo menos um resultado na coluna for numérico, a coluna será uma coluna numérica, e será possível selecionar um formato numérico para a coluna. Se nenhum dos resultados na coluna de resultados for numérico, a coluna será uma coluna de texto.

É possível usar a sinalização em colunas de tabelas de resultados criadas com a pesquisa condicional. Também é possível usar essas colunas em fórmulas.

Editor de pesquisa condicional

A imagem a seguir mostra a interface do editor de pesquisa condicional.

Figura 3-1: Editor de pesquisa condicional



Pesquisa condicional

Item	Descrição
1	A etapa Colunas calculadas no fluxo de trabalho do método de processamento. Clique para abrir a página Colunas calculadas e clique em Adicionar > Pesquisa condicional .
2	O campo Nome . Digite um nome para a fórmula. <hr/> Dica! A pesquisa condicional será adicionada como uma coluna na tabela de resultados após o processamento. O cabeçalho da coluna é o nome da pesquisa condicional. Para aproveitar mais o espaço na tela, recomendamos usar nomes curtos. As informações detalhadas podem ser incluídas no campo Descrição . <hr/>
3	O campo Descrição . A descrição será mostrada na página Colunas calculadas.
4	O número de linhas e colunas na tabela. Para alterar o número de colunas ou linhas, digite um número no campo Contagem de colunas ou Contagem de linhas . Ou então, clique no ícone  aplicável para adicionar uma coluna ou linha.
5	Conjunto de opções que controlam as ações em entradas de texto. O campo Tratar valores do texto resultante como é importante em colunas de tabelas de resultados que contenham saídas de texto e numéricas, como N/D e os símbolos de deterioração e infinito. Para obter mais informações, consulte a seção: A opção Tratar valores do texto resultante como
6	Clique para selecionar todas as linhas.
7	Clique para excluir as linhas selecionadas.
8	As colunas que serão usadas na pesquisa condicional. É possível usar colunas de texto, colunas calculadas e colunas de pesquisa condicional personalizadas. <hr/> Nota: este campo tem um menu de clique com o botão direito que pode ser usado para adicionar, excluir, copiar e colar colunas. <hr/>

Item	Descrição
9	<p>A condição que será usada na tabela de pesquisa condicional. As condições disponíveis incluem:</p> <ul style="list-style-type: none"> • É igual a • Não é igual a • Começa com • Contém • Menor que • Menor ou igual • Maior que • Maior ou igual
10	<p>O valor que será usado na instrução de condição. O valor precisa estar correto para o tipo de coluna da tabela de resultados. O valor pode ser numérico, booleano (true ou false) ou de texto.</p> <hr/> <p>Nota: este campo tem um menu de clique com o botão direito que pode ser usado para adicionar, excluir, copiar e colar colunas e linhas.</p> <hr/>
11	<p>O valor ou texto que será mostrado na coluna de pesquisa condicional quando todas as condições forem satisfeitas.</p> <hr/> <p>Nota: este campo tem um menu de clique com o botão direito que pode ser usado para adicionar, excluir, copiar e colar colunas e linhas.</p> <hr/>
12	<p>Marque a caixa de seleção para selecionar uma linha para exclusão.</p>
13	<p>O valor ou texto que será mostrado na coluna de pesquisa condicional quando nenhuma das condições forem satisfeitas.</p> <hr/> <p>Nota: este campo tem um menu de clique com o botão direito que pode ser usado para recortar, copiar e colar conteúdo neste campo.</p> <hr/>
14	<p>Opções para salvar ou descartar a pesquisa condicional.</p>

Exemplos: pesquisa condicional

Exemplo: limites mínimo e máximo reportáveis controlados por analito (Nome do composto) e tipo de matriz de amostra (ID da amostra)

Figura 3-2: Tabela de pesquisa condicional: valor de Saída definido como um limite mínimo reportável em relação ao analito e ao tipo de matriz de amostra

Workflow: Accept changes and return to Calculated Columns | Discard

Name: LRL

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

Table Properties: Column count: 2 | Row count: 45

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

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"/>	Coccaethylene 1	Urine	0.001
<input type="checkbox"/>	Coccaethylene 1	Serum	0.0025
<input type="checkbox"/>	Coccaethylene 1	Oral Fluid	0.001
<input type="checkbox"/>	Coccaethylene 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: Tabela de pesquisa condicional: valor de Saída definido como um limite máximo reportável em relação ao analito e ao tipo de matriz de amostra

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

Pesquisa condicional

Figura 3-4: Tabela de resultados: colunas de pesquisa condicional LRL e 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

Exemplo: o fator de diluição que será usado nas concentrações calculadas de amostras desconhecidas (Tipo da amostra) controlado pelo tipo de matriz de amostra (ID da amostra)

Figura 3-5: Tabela de pesquisa condicional: valor de Saída definido como fator de diluição em relação ao tipo de matriz de amostra

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Name: x Dil. Factor

Description: Dilution Factor applied to different matrices

Table Properties: Column count 2 + Row count 3 + Note: The "Original text" option is recommended for numeric columns that might have non-numeric values. Treat resulting text values as Original text ▾

Select All Rows Delete Selected Rows

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

Default output

Pesquisa condicional

Figura 3-6: Fórmula: coluna de pesquisa condicional aplicada a Concentração 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	+
/	*	-	=

◀ ● ○ ○ ▶

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

Treat resulting text values as:

[Calculated Concentration]*[x Dil. Factor]

▼ Formula Details

Columns: ✕ Regression parameters

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

Process & Close Print Close Help

Figura 3-7: Tabela de resultados: concentração 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

A **Precisão de formato do número** dos valores numéricos aplicados na caixa de diálogo Configurações de exibição da tabela de resultados não é incluída nas fórmulas matemáticas. As fórmulas operam no valor subjacente integral.

Pesquisa condicional

O mesmo se aplica à comparação de valores numéricos. Quando a pesquisa condicional é aplicada a um número na tabela de resultados, o número na tabela de pesquisa condicional precisa ser igual ao valor subjacente integral, com até 15 dígitos. Se for feita a comparação com o número mostrado na tabela de resultados, a correspondência poderá não ser feita.

Figura 3-8: Precisão de formato do 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: Numeric Comparison

Description: Comparing numeric value in lookup table with Results Table values

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

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: Tabela de resultados: Precisão de formato do 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	

Pesquisa condicional

Figura 3-10: Fórmula: Precisão de formato do 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 ▾

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

Figura 3-11: Tabela de resultados: Precisão de formato do número=3

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

Referência de fórmula

A

Tabela A-1: Funções

Função	Descrição
ABS	Obtém o valor absoluto do número especificado. Sintaxe: ABS (<i>n</i>) Exemplo: ABS (-1)
ACOS	Obtém o ângulo com o cosseno que é o valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado. A função ACOS não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada. Sintaxe: ACOS (<i>n</i>) Em que: <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> é o cosseno, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.
ASIN	Obtém o ângulo com o seno que é o valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado. A função ASIN não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada. Sintaxe: ASIN (<i>n</i>) Em que: <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> é o seno, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
ATAN	<p>Obtém o ângulo com o arco tangente que é o valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado. A função ATAN não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>ATAN (<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> é o arco tangente, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.
CEILING ^{2 3}	<p>Obtém o menor número inteiro que seja maior ou igual ao valor mostrado na coluna especificada da tabela de resultados ou ao número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>CEILING ([<i>Results Table column</i>])</p> <p>Exemplo: CEILING ([<i>Calculated Concentration</i>])</p>
COS	<p>Obtém o cosseno de um ângulo, que pode ser especificado como o valor de uma coluna da tabela de resultados ou um número. A função COS não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>COS (<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> é o ângulo, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.
CONTAGEM	Obtém o número de itens em um conjunto.

² A função pode ser usada para funções dentro de funções e com números especificados pelo usuário.

³ A coluna selecionada pelo usuário à qual essas funções são aplicadas precisa estar no formato de número.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
EXP	<p>Eleva e à potência especificada, que pode ser o valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>EXP (<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none">• <i>n</i> é a potência, que pode ser especificada como uma coluna da tabela de resultados ou como um número. <hr/> <p>Nota: se a potência for maior que 709, será mostrado N/A.</p> <hr/>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
FIND ⁴	<p>Obtém a posição dos caracteres especificados no texto em uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <pre>FIND('search string';[Results Table column];n)</pre> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>search string</i> é o texto ou valor numérico a ser encontrado. • <i>n</i> é a posição do caractere a partir da qual é iniciada a contagem de um segmento de texto. <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • A função FIND pode ser usada em FIND ou outra função. • Quando a função FIND é usada em uma função FIND, a FIND interna é realizada primeiro. A posição subsequente é usada como o índice inicial para a FIND externa. • Se a FIND fornecer um valor inválido, ou seja, se <i>search string</i> não for encontrado, a fórmula será tratada como inválida e a opção selecionada para Tratar valores do texto resultante como controlará o valor de saída. • Se a função FIND for aplicada a uma entrada inválida e Tratar valores do texto resultante como for definido como Texto original, será mostrado N/A na coluna relacionada da tabela de resultados. • A função FIND não suporta caracteres curinga.

⁴ O texto usado nesta função diferencia maiúsculas de minúsculas.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
FLOOR ^{2 3}	<p>Obtém o maior número inteiro que seja menor ou igual ao número mostrado na coluna especificada da tabela de resultados ou ao número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>FLOOR(<i>[Results Table column]</i>)</p> <p>Exemplo: FLOOR(<i>[Calculated Concentration]</i>)</p>
GET	<p>Obtém o valor para o componente especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GET(<i>[Results-Table-column]</i>; '<i>Component-Name</i>')</p>
GETGROUP	<p>Obtém o valor para a transição especificada em um grupo.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETGROUP(<i>[Results-Table-column]</i>; <i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é o número da transição no grupo. <hr/> <p>Nota: se nenhum grupo for identificado na seção Componentes, as funções GETGROUP tratarão todos os componentes como membros do mesmo grupo.</p>
GETSAMPLE ^{5 6}	<p>Obtém valores de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados para a amostra do tipo selecionado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETSAMPLE(<i>[Results Table column]</i>; '<i>Sample Name</i>')</p> <p>Exemplo: GETSAMPLE(<i>[Area]</i>; '<i>Low QC</i>')</p>

⁵ Se várias amostras tiverem o mesmo *Nome da amostra*, o software fornecerá dados da primeira amostra processada com uma correspondência.

⁶ Se o *Nome da amostra* não for encontrado na tabela de resultados, o resultado será controlado pela opção selecionada para **Tratar valores do texto resultante como**.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
GETSAMPLECLOSEST ^{7 8 9 10 11}	<p>Obtém o valor de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados para a amostra do tipo selecionado que tenha um valor mais próximo ao especificado pelo usuário.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETSAMPLECLOSEST(<i>[Results Table column 1]</i>; <i>[Results Table column 2]</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> é o valor de saída. • <i>Results Table column 2</i> é o valor de entrada. <p>Exemplo¹²: GETSAMPLECLOSEST(<i>[Ion Ratio]</i>; <i>[Area]</i>)</p>
GETSAMPLECLOSESTLOW ^{7 8 9 10 11}	<p>Obtém o valor de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados para a amostra mais próxima do tipo selecionado que tenha um valor menor ou igual ao especificado pelo usuário.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETSAMPLECLOSESTLOW(<i>[Results Table column 1]</i>; <i>[Results Table column 2]</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> é o valor de saída. • <i>Results Table column 2</i> é o valor de entrada. <p>Exemplo¹²: GETSAMPLECLOSESTLOW(<i>[Ion Ratio]</i>; <i>[Area]</i>)</p>

⁷ O valor de entrada precisa ser uma coluna numérica.

⁸ A função usa a precisão do valor numérico nos dados armazenados para a comparação, não a precisão configurada na tabela de resultados.

⁹ Se várias amostras processadas tiverem o mesmo valor de entrada, o software fornecerá dados da primeira amostra processada com uma correspondência.

¹⁰ Se o valor de entrada especificado não estiver na tabela de resultados, o resultado será controlado pela opção selecionada para **Tratar valores do texto resultante como**.

¹¹ A seleção do tipo de amostra está disponível para o valor de entrada.

¹² As quebras de linha não são válidas em fórmulas. Se uma fórmula for colada no campo de fórmulas, remova as quebras de linha.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>GETSAMPLECLOSESTHIGH ^{7 8 9 10 11}</p>	<p>Obtém o valor de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados para a amostra mais próxima do tipo selecionado que tenha um valor maior ou igual ao especificado pelo usuário.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETSAMPLECLOSESTHIGH ([<i>Results Table column 1</i>]; [<i>Results Table column 2</i>])</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> é o valor de saída. • <i>Results Table column 2</i> é o valor de entrada. <p>Exemplo¹²: GETSAMPLECLOSESTHIGH ([Ion Ratio]; [Area])</p>
<p>GETSAMPLEEQUAL ^{7 8 9 10 11}</p>	<p>Obtém o valor de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados para a amostra do tipo selecionado que tenha um valor igual ao especificado pelo usuário.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETSAMPLEEQUAL ([<i>Results Table column 1</i>]; [<i>Results Table column 2</i>])</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column 1</i> é o valor de saída. • <i>Results Table column 2</i> é o valor de entrada. <p>Exemplo: GETSAMPLEEQUAL ([Ion Ratio]; [Area])</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
GETSTAT	<p>Adiciona a coluna Média, Desvio padrão, CV percentual ou Precisão média entre réplicas mostrada no painel Estatísticas à Tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <pre>GETSTAT ('Statistics-pane-column'; 'Metric'; 'Grouping')</pre> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Statistics-painel-coluna</i> precisa corresponder exatamente ao nome da coluna que mostra o painel Estatísticas. • <i>Métrica</i> é a propriedade para a qual a estatística será calculada. As estatísticas podem ser calculadas para Concentração calculada, Área, Altura e Valor Y da calibração. • (Opcional) <i>Grouping</i> especifica como as amostras de um analito serão dispostas em grupos para o cálculo das estatísticas. As seguintes opções estão disponíveis: Concentração real, Nome da amostra, ID da amostra, Prefixo do nome da amostra, Comentário de amostra, Código de barras, Código de barras escaneado e Posição da injeção. Se uma opção de agrupamento não for especificada, Concentração real será usada. <hr/> <p>Nota: Se uma opção de agrupamento não for selecionada, GETSTAT extrairá valores estatísticos (média, desvio padrão, % de CV e precisão média em réplicas) para tipos de amostra padrão e amostras de controle de qualidade, agrupadas por concentração real.</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>GETVALUE⁸</p>	<p>Compara os valores em duas colunas da tabela de resultados ou em uma coluna da tabela de resultados e um valor especificado pelo usuário. Quando os valores forem iguais, a função obtém o valor de uma terceira coluna da tabela de resultados. A função GETVALUE não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>GETVALUE ([<i>Results Table Column 1</i>]);<i>n1</i>; [<i>Results Table Column 2</i>]</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table Column 1</i> é a coluna onde a função obterá o valor quando <i>n1</i> for igual a <i>Results Table Column 2</i>. • <i>n1</i> é a coluna ou valor especificado pelo usuário que será usado na comparação. <i>n1</i> pode ser uma coluna da tabela de resultados, coluna calculada, coluna de texto personalizada, número ou texto. As colunas devem ficar entre colchetes: []. O texto deve ficar entre aspas simples. Os números não podem ficar entre aspas. • <i>Results Table Column 2</i> é uma coluna da tabela de resultados, coluna calculada ou coluna de texto personalizada que será usada na comparação. <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Se mais de uma amostra tiver o mesmo valor de entrada, a função obterá dados da primeira amostra processada. • Se os valores de entrada não forem encontrados na tabela de resultados, o resultado será controlado pela opção selecionada para Tratar valores do texto resultante como. • A seleção do tipo de amostra está disponível para o valor de entrada.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
IEEEREMAINDER	<p>Obtém o resto resultante da divisão de uma coluna da tabela de resultados ou de um número especificado pelo usuário por uma coluna da tabela de resultados ou por um número especificado pelo usuário. A função IEEEREMAINDER não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>IEEEREMAINDER (<i>n1</i>; <i>n2</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none">• <i>n1</i> é o dividendo ou o número a ser dividido, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.• <i>n2</i> é o divisor, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>IF</p>	<p>Realiza um teste lógico e fornece um resultado verdadeiro ou falso. Use as funções IF aninhadas para testar mais de uma condição. A função IF pode ser combinada com outras funções lógicas, como e e ou para ampliar um teste lógico.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>IF(<i>condition</i>; <i>value if true</i>; <i>value if false</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>condition</i> é um valor ou expressão lógica que podem ser considerados verdadeiros ou falsos. • <i>value if true</i> é um valor a ser mostrado na coluna relacionada da tabela de resultados quando <i>condition</i> for verdadeira. • <i>value if false</i> é um valor a ser mostrado na coluna relacionada da tabela de resultados quando <i>condition</i> for falso. <hr/> <p>Nota: O símbolo da função IF pode ser selecionado na calculadora, digitado ou copiado de outra fonte. A função IF não diferencia maiúsculas de minúsculas.</p> <hr/> <p>Nota: Os caracteres && e podem ser usados para e e ou, respectivamente. Os operadores e e ou precisam estar entre espaços, mas os operadores && e , não.</p> <hr/> <p>As funções numéricas podem ser usadas em uma fórmula com uma função IF. Funções numéricas, como MEAN e STDEV, podem ser usadas nas expressões <i>condition</i>, <i>value if true</i>, ou <i>value if false</i>.</p> <p>As condições IF podem testar as luzes de tráfego de confiança para estas colunas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Mass Confidence • Confiança do erro de massa do fragmento • Confiança de RT • Confiança do isótopo

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
	<ul style="list-style-type: none"> • Confiança da biblioteca • Confiança da fórmula • Combined rules <p>As luzes de tráfego de confiança podem ser testadas para os valores Verde, Amarelo, Vermelho ou Cinza.</p>
IN	<p>Identifica se um elemento está em um conjunto de valores. Se o elemento está no conjunto, é retornado <code>true</code>. Se o elemento não está no conjunto, é retornado <code>false</code>.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>IN ([<i>Results Table column</i>] <i>number</i> <i>string</i> <i>function</i>; <i>value 1</i>; <i>value 2</i>; <i>value 3</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table column</i>, <i>número</i>, <i>string</i>, ou <i>function</i> é especificado para pesquisar uma coluna da tabela de resultados, número, sequência de texto ou função. • <i>value 1</i>; <i>value 2</i>; <i>value 3</i> é uma lista de até 100 valores a serem encontrados no conjunto. Os valores podem ser números, texto ou funções. <p>Exemplo: IN([Actual Concentration]; 1;2;3)</p>
INTERCEPT	<p>Obtém o ponto em que o gráfico de uma função ou relação cruza com o eixo oposto do sistema de coordenadas.</p> <p>Sintaxe:</p> <ul style="list-style-type: none"> • INTERCEPT ([<i>X-value</i>]; [<i>Y-value</i>]) • INTERCEPT ([<i>Y-value</i>]) <hr/> <p>Nota: Se somente um valor for especificado, ele será usado como <i>valor Y</i>, e Concentração real será usado como <i>valor X</i>.</p> <hr/> <p>INTERCEPT refere-se à regressão linear ($y = ax + b$).</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>ISNUMBER</p>	<p>Identifica um valor em uma célula na tabela de resultados como numérico ou não numérico. Se o valor é um número, é retornado <code>true</code>. Se o valor não é um número, é retornado <code>false</code>.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>ISNUMBER ([Results Table column])</p> <p>Exemplo¹²: ISNUMBER ([Calculated Concentration])</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Quando ISNUMBER é usado em declarações complexas, por exemplo, com uma função IF, o resultado (<code>true</code> ou <code>false</code>) precisa estar em letras minúsculas e sem aspas.</p> <p>Exemplo: IF (ISNUMBER ([Area]) = <code>true</code>; 'compound present'; 'compound not present')</p> <hr/>
<p>LEFT ^{13 14 15}</p>	<p>Obtém um número especificado de caracteres do início do texto.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>LEFT ([Results Table column]; n)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é a quantidade de caracteres a ser obtida. <p>Exemplo: LEFT ([Sample ID]; 4)</p>
<p>LOG</p>	<p>Obtém o logaritmo do valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>LOG (1; 10)</p>

¹³ A função pode ser usada com outras funções.

¹⁴ A função pode ser usada em colunas de número, texto ou booleano.

¹⁵ É recomendável usar a função em colunas de texto.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
LOG10	<p>Obtém o logaritmo de base 10 do valor de uma coluna da tabela de resultados ou o número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>LOG10 (1)</p>
MAD	(Desvio absoluto da mediana) Obtém uma medida da variabilidade de uma amostra univariada de dados quantitativos. A função MAD não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.
MAX	Obtém o maior valor em um conjunto.
MEAN	Obtém a soma de uma lista de números divididos pelo número de números na lista.
MEDIAN	Obtém o valor que divide a metade mais alta de uma amostra de dados, uma população, ou uma distribuição de probabilidade da metade mais baixa.
MIN	Obtém o menor valor em um conjunto.
POW	<p>Obtém um número determinado elevado à potência especificada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>POW (n1; n2)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n1</i> é o número ser elevado, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados, função ou número. • <i>n2</i> é a potência, que pode ser especificada como uma coluna da tabela de resultados, função ou número. <p>Exemplo: POW (2, 3)</p> <hr/> <p>Nota: se o resultado for maior que 1.7E+308, será mostrado N/A.</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>RIGHT ^{13 14 15}</p>	<p>Obtém um número especificado de caracteres do final do texto.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>RIGHT ([<i>Results Table Column</i>];<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é o número de caracteres a ser obtido. <p>Exemplo: RIGHT ([Barcode];3)</p>
<p>ROUND ^{2 3}</p>	<p>Arredonda o número na coluna especificada da tabela de resultados ou o número definido pelo usuário para o inteiro mais próximo ou para o número de casas decimais especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>ROUND ([<i>Results Table column</i>];<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é o número de casas decimais. • Se $n > 0$, o número será arredondado para o número de casas decimais especificado. • Se $n = 0$, o número será arredondado para o número inteiro mais próximo; ou seja, nenhuma casa decimal será usada. • Se $n < 0$, o número será arredondado para o número à esquerda da casa decimal. <p>Exemplo: ROUND ([Calculated Concentration];0)</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
SEARCH ^{13 16 17}	<p>Obtém a posição dos caracteres especificados no texto em uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>SEARCH('search string'; [Results Table column]);n)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>search string</i> é o texto ou valor numérico a ser encontrado. • <i>n</i> é a posição do caractere a partir da qual é iniciada a contagem de um segmento de texto. <p>SEARCH aceita caracteres curinga. Consulte a tabela: Tabela A-2.</p>
SIGN	<p>Obtém o valor que identifica o sinal do valor de uma coluna da tabela de resultados ou do número especificado. A função SIGN não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>SIGN(<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é a potência, que pode ser especificada como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.

¹⁶ O texto usado nesta função não diferencia maiúsculas de minúsculas.

¹⁷ Se o *search string* não for encontrado, o resultado será controlado pela opção selecionada para **Tratar valores do texto resultante como**. Se **Tratar valores do texto resultante como** for definido como **Texto original**, a função obterá **N/A**.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
SIN	<p>Obtém o seno de um ângulo especificado como o valor de uma coluna da tabela de resultados ou como um número. A função SIN não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>SIN (<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>n</i> é o ângulo, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.
SLOPE	<p>Obtém um número que identifica a direção e a inclinação da linha. Também referido como <i>gradiente</i>.</p> <p>Sintaxe:</p> <ul style="list-style-type: none"> SLOPE ([<i>X-value</i>]; [<i>Y-value</i>]) SLOPE ([<i>Y-value</i>]) <hr/> <p>Nota: Se somente um valor for especificado, ele será usado como <i>valor Y</i>, e Concentração real será usado como <i>valor X</i>.</p> <hr/> <p>SLOPE refere-se à regressão linear ($y = ax + b$).</p>
SQRT	<p>Obtém a raiz quadrada do valor de uma coluna da tabela de resultados ou do número especificado.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>SQRT (<i>n</i>)</p>
STDEV	<p>(Desvio padrão) Obtém uma medida usada para quantificar o valor da variação ou dispersão de um conjunto de valores de dados.</p>

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
SUBSTITUTE ^{4 13}	<p>Cria uma coluna na tabela de resultados que substitui um valor alfanumérico por outro valor alfanumérico de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>SUBSTITUTE ([Results Table column]; 'original alphanumeric value'; 'new alphanumeric value'; n)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> (opcional) é a ocorrência do <i>valor alfanumérico original</i> que será substituído pelo <i>novo valor alfanumérico</i>. Se <i>n</i> for especificado, somente a <i>n</i> instância do valor será substituída. Caso contrário, da instância do valor antigo será alterada para o novo valor. <p>Exemplo: SUBSTITUTE ([Sample Name]; 'STD'; 'STD_00')</p>
SUM	Obtém a soma da lista de números em um conjunto.
TAN	<p>Obtém a tangente de um ângulo, que pode ser especificada como o valor de uma coluna da tabela de resultados ou como um número. A função TAN não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>TAN (<i>n</i>)</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>n</i> é o ângulo, que pode ser especificado como uma coluna da tabela de resultados ou como um número.

Tabela A-1: Funções (continuação)

Função	Descrição
<p>TEXT</p>	<p>Aplica códigos de formato a um número para alterar como o número é mostrado. A função pode ser usada para mostrar números em um formato mais legível ou para usar números, texto e símbolos juntos. É possível aplicar a formatação a colunas de texto ou números. Não é possível aplicar a formatação a colunas de valores booleanos. A função TEXT não está disponível na calculadora, mas pode ser digitada.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>TEXT ([<i>Results Table Column</i>]; '<i>format code</i>')</p> <p>Em que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Results Table Column</i> é a coluna que será formatada. • <i>format code</i> controla como o conteúdo da coluna será mostrado. Consulte as tabelas: Tabela A-3 a Tabela A-9.
<p>TRIM ¹³</p>	<p>Remove os espaços extras do texto. Todos os espaços internos, no início e no final, exceto os que dividem as palavras, são removidos de uma coluna padrão ou personalizada da tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>TRIM ([<i>Results Table column</i>])</p> <p>Exemplo: TRIM ([Barcode])</p>
<p>TRUNCATE</p>	<p>Obtém a parte integral de um número em uma coluna da tabela de resultados.</p> <p>Sintaxe:</p> <p>TRUNCATE ([<i>Results Table column</i>])</p>

Tabela A-2: Caracteres curinga

Caractere curinga	Descrição
?	<p>Um ponto de interrogação (?) encontra qualquer caractere único.</p> <p>Exemplo: SEARCH('?ard';[Component Comment];1)</p> <p>?ard encontra card no texto <i>Test wild card characters (?) e (*)</i>. A posição de retorno é 11.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Para procurar um ponto de interrogação (?), digite uma barra invertida (\) antes do caractere.</p> <p>Exemplo: SEARCH('\'?';[Component Comment];1)</p> <p>\? encontra ? no texto <i>Test wild card characters (?) e (*)</i>. A posição de retorno é 28.</p> <hr/>
*	<p>Um asterisco (*) encontra qualquer sequência de caracteres.</p> <p>Exemplo: SEARCH('*ard';[Component Comment];1)</p> <p>*ard encontra Test wild card no texto <i>Test wild card characters (?) e (*)</i>. A posição de retorno é 1.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Para procurar um asterisco (*), digite uma barra invertida (\) antes do caractere.</p> <p>Exemplo: SEARCH('\'*';[Component Comment];1)</p> <p>* encontra * no texto <i>Test wild card characters (?) e (*)</i>. A posição de retorno é 36.</p> <hr/>

Códigos de formato

Tabela A-3: Ano

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
00 a 99	yy	TEXT ([Results Table Column];'yy')	23

Referência de fórmula

Tabela A-3: Ano (continuação)

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
1900 a 9999	YYYY	TEXT ([Results Table Column]; 'yyyy')	2023

Tabela A-4: Mês

Formato	Código de formato ¹⁸	Sintaxe	Exemplo de resultado
1 a 12	M	TEXT ([Results Table Column]; 'M')	9
01 a 12	MM	TEXT ([Results Table Column]; 'MM')	09
jan a dez	MMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMM')	sep
janeiro a dezembro	MMMM	TEXT ([Results Table Column]; 'MMMM')	setembro

Tabela A-5: Dia

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
1 a 31	d	TEXT ([Results Table Column]; 'd')	4
01 a 31	dd	TEXT ([Results Table Column]; 'dd')	04
dom a sáb	ddd	TEXT ([Results Table Column]; 'ddd')	seg
domingo a sábado	dddd	TEXT ([Results Table Column]; 'dddd')	segunda-feira

Tabela A-6: Horas

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
0 a 12 (formato de 12 horas)	h	TEXT ([Results Table Column]; 'h')	9

¹⁸ O código de formato diferencia maiúsculas de minúsculas. A letra *m* minúscula é usada para formatar minutos.

Tabela A-6: Horas (continuação)

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
01 a 12 (formato de 12 horas)	hh	TEXT ([Results Table Column]; 'hh')	09
AM ou PM (formato de 12 horas)	AM/PM	TEXT ([Results Table Column]; 'h AM/PM')	9 PM
0 a 24 (formato de 24 horas)	H	TEXT ([Results Table Column]; 'H')	21
00 a 24 (formato de 24 horas)	HH	TEXT ([Results Table Column]; 'HH')	09

Tabela A-7: Minutos

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
0 a 59	m	TEXT ([Results Table Column]; 'm')	7
00 a 59	mm	TEXT ([Results Table Column]; mm)	07

Tabela A-8: Segundos

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
0 a 59	s	TEXT ([Results Table Column]; 's')	2
00 a 59	ss	TEXT ([Results Table Column]; ss)	02

Tabela A-9: Números

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
Casas decimais	Separador decimal seguido de um 0 para cada casa decimal necessária	TEXT ([Results Table Column]; '#.00')	,24

Referência de fórmula

Tabela A-9: Números (continuação)

Formato	Código de formato	Sintaxe	Exemplo de resultado
Zero na primeira casa para números menores que um	0 na primeira casa	TEXT ([Results Table Column]; '0.000')	0,245
Porcentagem	%	TEXT ([Results Table Column]; '0%')	24%
Separador de milhares	# ou 0 para cada dígito até a casa dos milhares, com o separador necessário na posição correta	TEXT ([Results Table Column]; #,###)	12.200.000
Notação científica	E+0	TEXT ([Results Table Column]; '0.0E+0')	1.2E+7

Entre em contato conosco

Treinamento do consumidor

- Na América do Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- Na Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fora da União Europeia e da América do Norte, visite sciex.com/education para obter informações de contato.

Centro de aprendizagem online

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Suporte da SCIEX

A SCIEX e seus representantes têm uma equipe global de especialistas técnicos e de serviços totalmente treinados. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que surjam. Para obter mais informações, acesse o site da SCIEX em sciex.com ou use um dos links abaixo para entrar em contato conosco.

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

Segurança cibernética

Para obter informações sobre as orientações mais recentes sobre cibersegurança para produtos da SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentação

Esta versão substitui todas as versões anteriores deste documento.

Para ver este documento eletronicamente é necessário ter o Adobe Acrobat Reader. Para fazer download da versão mais recente, acesse <https://get.adobe.com/reader>.

Para encontrar a documentação do software, consulte as notas de versão do software ou o guia de instalação do software que o acompanha.

Para encontrar a documentação do produto de hardware, consulte a documentação que acompanha o sistema ou o componente.

As versões mais recentes da documentação estão disponíveis no site da SCIEX, em sciex.com/customer-documents.

Entre em contato conosco

Nota: Para solicitar uma versão impressa gratuita, entre em contato com scix.com/contact-us.
