Mascara D/T2

Cálculos D/T2

Seleccionar rango x e y

Gráfico combinado

Tabla Bibliográfica fija

Señal d pico

Cálculo de señales

HOJA Análisis RMN

Selección de muestras: se permite seleccionar múltiples muestras. Luego, se seleccionan espectros específicos para cada muestra.

SECCION “RMN 1H”

Checkbox ‘Máscara D/T2’: Checkbox que permite sombrear el grafico con los rangos de máscaras D y T2. Al activar el checkbox ‘Máscara D/T2’ se crean debajo nuevos checkbox en un mismo renglón para activar/desactivar el sombreado de cada muestra seleccionada. En Firebase existen valores para cada espectro de x min y x max asociados a valores de D, de T2, o de D y T2.



Checkbox ‘Cálculo D/T2’: Checkbox que activa/desactiva una tabla editable de Columnas ["Muestra", "Grupo funcional", "δ pico", "X min", "X max", "Área", "D", "T2", "Xas min", "Xas max", "Has", "Área as", "H", "Observaciones", "Archivo"].

"Muestra", "Archivo": son columnas que se cargan a partir de la muestra seleccionada y el nombre de archivo asociado en Firebase

"Observaciones" es un campo que debe estar asociado a "Muestra", "Grupo funcional", "Archivo" en firebase para que sea accesible desde otra parte de la app con esta asociación.

"Grupo funcional" debe llenarse manualmente pero limitarse a una lista global compuesta por ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"δ pico", "Xas min", "Xas max", "Has": se ingresan manualmente

"X min", "X max", "D", "T2": se obtienen de Firestore y están asociados a cada espectro especifico

"Área": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "X min", "X max"

"Área as": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "Xas min", "Xas max"

"H": se calcula con una fórmula a partir de "Área", "Área as" y "Has" (después te paso la formula si no la recuerdas)

Para actualizar el cálculo de "Área", "Área as" y "H", se crea el botón "🔴Recalcular 'Área', 'Área as' y 'H'". No recalcular automáticamente

Las modificaciones que se realicen en la tabla deben ser guardadas automáticamente en Firebase para tener permanencia de esta información

Checkbox ‘Señales Pico Bibliografía’: Al activarse se genera un nuevo checkbox llamado ‘Editar Tabla Bibliográfica’ y se trazan líneas verticales segmentadas negras con etiquetas verticales. Estas líneas se trazan a partir de valores de eje x que provienen de la tabla editable que se muestra al activar ‘Editar Tabla Bibliográfica’. La tabla editable debe mostrarse si se activa su checkbox ‘Editar Tabla Bibliográfica’. Las columnas de la tabla editable son "Grupo funcional", "X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones".

"Grupo funcional", "X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones".

"Grupo funcional": debe llenarse manualmente a partir la lista global ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones": se llenan manualmente sin estar asociados a valores en otras tablas o secciones diferentes.

Rango de visualización en una sola fila para el gráfico que vamos a generar. Permite limitar el rango de los ejes

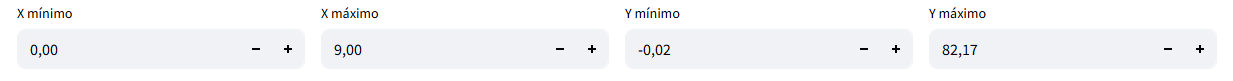


Gráfico combinado: Eje x llamado ‘[ppm]’. Eje y llamado ‘Señal’

Checkbox ‘Cálculo de señales’: Checkbox que activa/desactiva una tabla editable de Columnas ["Muestra", "Grupo funcional", "δ pico", "X min", "X max", "Área", "D", "T2", "Xas min", "Xas max", "Has", "Área as", "H", "Observaciones", "Archivo"].

"Muestra", "Archivo": son columnas que se cargan a partir de la muestra seleccionada y el nombre de archivo asociado a ella en Firebase

"Observaciones" es un campo que debe estar asociado a "Muestra", "Grupo funcional", "Archivo" en firebase para que sea accesible desde otra parte de la app con esta asociación.

"Grupo funcional" debe llenarse manualmente a partir de una lista global ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"X min", "X max", "D", "T2", "δ pico", "Xas min", "Xas max", "Has": se ingresan manualmente y se almacenan en Firestore como valores diferentes de los homólogos en otras tablas.

"Área": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "X min", "X max"

"Área as": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "Xas min", "Xas max"

"H": se calcula con una fórmula a partir de "Área", "Área as" y "Has"

Para actualizar el calculo de "Área", "Área as" y "H", se crea el botón "🔴Recalcular 'Área', 'Área as' y 'H'". No recalcular automáticamente

Las modificaciones que se realicen en la tabla deben ser guardadas automáticamente en Firebase para tener permanencia de esta informacion

¿La tabla de ‘Cálculo D/T2’ y la de ‘Cálculo de señales’ pueden coexistir activas al mismo tiempo, o deberían ser mutuamente excluyentes (una u otra)?

Las 2 tablas deben poder existir mutuamente. ‘Cálculo D/T2’ resume informacion que me entrega una maquina y yo necesito ajustar algunas cosas en ‘Cálculo de señales’ para que se adecuen los resultados. Por eso deben poder coexistir, almacenar la informacion de ambas tablas con persistencia, ya sea la informacion que comparten como también la informacion donde se diferencian.

Cuando decís que D, T2, X min, X max están en Firebase “asociados a cada espectro específico”, ¿eso significa que están en espectros/.../mascaras o en una estructura diferente (ej: muestras/[nombre]/dt2/datos)?

Desconozco como los almacena Firebase internamente. Estos datos se ingresan manualmente en hoja 3 cuando se carga un espectros. Se ingresan valores de D, T2, X min, X max asociados al espectro que se está cargando.

¿La tabla de ‘Cálculo de señales’ debe iniciarse vacía cada vez, o debería recuperar datos previos (si existen) desde tablas\_integrales/rmn1h?

Debería tener permanencia de sus datos. Comparte la asociación ‘Muestra’, ‘Archivo’ y ‘Observaciones’ global pero los demás datos deben almacenarse de manera independiente a otras tablas y tener permanencia.

¿Querés que la tabla de 'Cálculo D/T2' muestre una fila por cada máscara que haya en Firebase, o que permita agregar filas manualmente aunque no haya máscara asociada?

Quiero que 'Cálculo D/T2' muestre una fila por cada máscara que haya en Firebase, me permite editar estos valores almacenados en firebase y añadir nuevas filas que se almacenaran en firebase

¿La lista de espectros a graficar debería estar limitada a un único espectro por muestra (el primero disponible), o permitís que se grafiquen múltiples espectros por muestra si el usuario los selecciona?

Permitir que se grafiquen múltiples espectros por muestra si el usuario los selecciona.

Integral entre "X min" y "X max" = "Area"

Integral entre "Xas min" y "Xas max" = "Area as"

"H" = ("Area" \* "Has") / "Area as"

HOJA Análisis RMN

Selección de muestras: se permite seleccionar múltiples muestras. Luego, se seleccionan espectros específicos para cada muestra. Utilizar la lógica actual.

SECCION “RMN 1H”

Checkbox ‘Máscara D/T2’: Checkbox que permite sombrear el grafico con los rangos de máscaras D y T2. Al activar el checkbox ‘Máscara D/T2’ se crean debajo nuevos checkbox en un mismo renglón para activar/desactivar el sombreado de cada muestra seleccionada. En Firebase existen valores para cada espectro de x min y x max asociados a valores de D, de T2, o de D y T2.



Checkbox ‘Cálculo D/T2’: Checkbox que activa/desactiva una tabla editable de Columnas ["Muestra", "Grupo funcional", "δ pico", "X min", "X max", "Área", "D", "T2", "Xas min", "Xas max", "Has", "Área as", "H", "Observaciones", "Archivo"].

"Muestra", "Archivo": son columnas que se cargan a partir de la muestra seleccionada y el nombre de archivo asociado en Firebase

"Observaciones" es un campo que debe estar asociado a "Muestra", "Grupo funcional", "Archivo" en firebase para que sea accesible desde otra parte de la app con esta asociación.

"Grupo funcional" debe llenarse manualmente pero limitarse a una lista global compuesta por ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"δ pico", "Xas min", "Xas max", "Has": se ingresan manualmente

"X min", "X max", "D", "T2": se obtienen de Firestore y están asociados a cada espectro especifico

"Área": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "X min", "X max"

"Área as": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "Xas min", "Xas max"

"H": se calcula con una fórmula a partir de "Área", "Área as" y "Has" (después te paso la formula si no la recuerdas)

Para actualizar el cálculo de "Área", "Área as" y "H", se crea el botón "🔴Recalcular 'Área', 'Área as' y 'H'". No recalcular automáticamente

Las modificaciones que se realicen en la tabla deben ser guardadas automáticamente en Firebase para tener permanencia de esta información

Checkbox ‘Señales Pico Bibliografía’: Al activarse se genera un nuevo checkbox llamado ‘Editar Tabla Bibliográfica’ y se trazan líneas verticales segmentadas negras con etiquetas verticales. Estas líneas se trazan a partir de valores de eje x que provienen de la tabla editable que se muestra al activar ‘Editar Tabla Bibliográfica’. La tabla editable debe mostrarse si se activa su checkbox ‘Editar Tabla Bibliográfica’. Las columnas de la tabla editable son "Grupo funcional", "X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones".

"Grupo funcional", "X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones".

"Grupo funcional": debe llenarse manualmente a partir la lista global ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"X min", "δ pico", "X max", "Tipo de muestra", "Observaciones": se llenan manualmente sin estar asociados a valores en otras tablas o secciones diferentes.

Rango de visualización en una sola fila para el gráfico que vamos a generar. Permite limitar el rango de los ejes

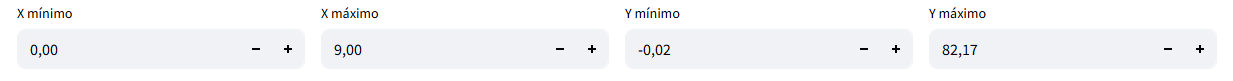


Gráfico combinado: Eje x llamado ‘[ppm]’. Eje y llamado ‘Señal’

Checkbox ‘Cálculo de señales’: Checkbox que activa/desactiva una tabla editable de Columnas ["Muestra", "Grupo funcional", "δ pico", "X min", "X max", "Área", "D", "T2", "Xas min", "Xas max", "Has", "Área as", "H", "Observaciones", "Archivo"].

"Muestra", "Archivo": son columnas que se cargan a partir de la muestra seleccionada y el nombre de archivo asociado a ella en Firebase

"Observaciones" es un campo que debe estar asociado a "Muestra", "Grupo funcional", "Archivo" en firebase para que sea accesible desde otra parte de la app con esta asociación.

"Grupo funcional" debe llenarse manualmente a partir de una lista global ["Glicerol medio", "Glicerol extremos", "OH", "C=C", "Epóxido", "Éter", "Ester", "Ácido carboxílico", "Formiato"]

"X min", "X max", "D", "T2", "δ pico", "Xas min", "Xas max", "Has": se ingresan manualmente y se almacenan en Firestore como valores diferentes de los homólogos en otras tablas.

"Área": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "X min", "X max"

"Área as": se calcula como la integral de cada espectro específico entre "Xas min", "Xas max"

"H": se calcula con una fórmula a partir de "Área", "Área as" y "Has"

Para actualizar el calculo de "Área", "Área as" y "H", se crea el botón "🔴Recalcular 'Área', 'Área as' y 'H'". No recalcular automáticamente

Las modificaciones que se realicen en la tabla deben ser guardadas automáticamente en Firebase para tener permanencia de esta informacion

¿La tabla de ‘Cálculo D/T2’ y la de ‘Cálculo de señales’ pueden coexistir activas al mismo tiempo, o deberían ser mutuamente excluyentes (una u otra)?

Las 2 tablas deben poder existir mutuamente. ‘Cálculo D/T2’ resume informacion que me entrega una maquina y yo necesito ajustar algunas cosas en ‘Cálculo de señales’ para que se adecuen los resultados. Por eso deben poder coexistir, almacenar la informacion de ambas tablas con persistencia, ya sea la informacion que comparten como también la informacion donde se diferencian.

Cuando decís que D, T2, X min, X max están en Firebase “asociados a cada espectro específico”, ¿eso significa que están en espectros/.../mascaras o en una estructura diferente (ej: muestras/[nombre]/dt2/datos)?

Desconozco como los almacena Firebase internamente. Estos datos se ingresan manualmente en hoja 3 cuando se carga un espectros. Se ingresan valores de D, T2, X min, X max asociados al espectro que se está cargando.

¿La tabla de ‘Cálculo de señales’ debe iniciarse vacía cada vez, o debería recuperar datos previos (si existen) desde tablas\_integrales/rmn1h?

Debería tener permanencia de sus datos. Comparte la asociación ‘Muestra’, ‘Archivo’ y ‘Observaciones’ global pero los demás datos deben almacenarse de manera independiente a otras tablas y tener permanencia.

¿Querés que la tabla de 'Cálculo D/T2' muestre una fila por cada máscara que haya en Firebase, o que permita agregar filas manualmente aunque no haya máscara asociada?

Quiero que 'Cálculo D/T2' muestre una fila por cada máscara que haya en Firebase, me permite editar estos valores almacenados en firebase y añadir nuevas filas que se almacenaran en firebase

¿La lista de espectros a graficar debería estar limitada a un único espectro por muestra (el primero disponible), o permitís que se grafiquen múltiples espectros por muestra si el usuario los selecciona?

Permitir que se grafiquen múltiples espectros por muestra si el usuario los selecciona.

Integral entre "X min" y "X max" = "Area"

Integral entre "Xas min" y "Xas max" = "Area as"

"H" = ("Area" \* "Has") / "Area as"

Me di cuenta que en cada sección podemos subdividirla en:

Filtros (Sección NUEVA con funciones idénticas a ‘hoja 5 Analisis FTIR’):

Normalizar intensidad

Ajuste manual de eje Y

Restar espectro

Mostrar picos detectados automáticamente

Tablas:

Tabla de Cálculo D/T2

Tabla de Cálculo de señales

Tabla de Señales Pico Bibliográfica

Sombreados (checkbox en misma fila):

Sombreado con datos de ‘Tabla de Cálculo D/T2’: Aparecen checkbox individuales para cada espectro seleccionado. Checkbox para D y checkbox para T2 diferenciados. Datos de la tabla correspondiente.

Sombreado con datos de ‘Tabla de Cálculo de señales’: sombrear rango de x. Datos de la tabla correspondiente.

Sombreado o líneas con datos de ‘Tabla de Señales Pico Bibliográfica’: con etiqueta para identificar. Datos de la tabla correspondiente.

Gráficos controlados con el mismo ‘Rango de visualización’:

Gráfico combinado

Graficos individuales (se activa por checkbox)