Usage for MetCleaning cn

JasperShen

2016-12-22

只做 MS1 和 MS2 匹配

参数含义

- 1. data: 要处理的一级数据的名字。
- 2. sample.information: 要处理的一级数据的样品信息。
- 3. polarity: 数据的采集模式。"postive"或者"negative"。
- 4. MetFlowData: 要进行一级和二级匹配的数据的数据。
- 5. mz.tolerance: 匹配时的 mz 误差范围。默认为 30(±30ppm)。
- 6. rt.tolerance: 匹配时的 rt 误差范围。默认为 180(±180s)。

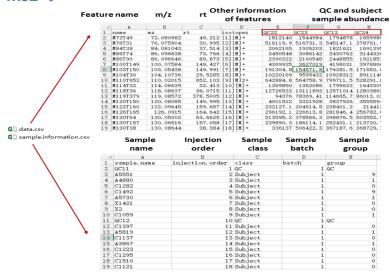
做所有处理过程

参数含义

1. data: 要处理的一级数据的名字。

- 2. sample.information: 要处理的一级数据的样品信息。
- 3. polarity:数据的采集模式。"postive"或者"negative"。
- 4. obs.zero.cutoff: 样品零值筛选的阈值, 当一个样品中的非零值超过这个阈值的时候,该样品应该被除去。
- 5. var.zero.cutoff: 变量零值筛选的阈值, 当一个变量中的非零值超过这个阈值的时候, 该变量应该被除去。
- 6. method: normalization 方法。
- 7. threads: 线程个数。
- 8. mz.tolerance: 匹配时的 mz 误差范围。默认为 30(±30ppm)。
- 9. mz.tolerance: 匹配时的 rt 误差范围。默认为 180(±180s)。
- 10. met.plot: 是否要把所有峰的 scatter plot 画出来。

处理所需数据,另外需要单独另外建立一个文件夹,命名为 peak identification,里面放入二级数据,且二级数据命名中必须包含 "ms2"。



对于那些可以超过零值比例的样品,可以选择是否删除掉。

```
Missing values filter...
No QC should be removed.
X257 A5546 X231 sholud be removed!!!
Subject shoulde be removed are:
65 160 177
```

Which subject you want to remove(please type the index of subject sample,65,160,177 and separate them using comma, if you don't want to remove any subject, please type n):