Usage for MetCleaning cn

JasperShen

2016-12-22

## 只做MS1和MS2匹配

##加载包  
library(MetCleaning)  
##读取数据  
met.data <- ImportData(data = "data.csv",  
 sample.information = "sample.information.csv",  
 polarity = "positive",   
 hasQC = "yes")  
##开始ms1和ms2匹配  
PeakIdentification(MetFlowData = met.data,   
 mz.tolerance = 30,   
 rt.tolerance = 180)

### 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. hasQC：数据中是否包含QC数据。
5. MetFlowData: 要进行一级和二级匹配的数据的数据。
6. mz.tolerance: 匹配时的mz误差范围。默认为30(±30ppm)。
7. rt.tolerance: 匹配时的rt误差范围。默认为180(±180s)。

## 做所有处理过程

##加载包  
library(MetCleaning)  
##开始处理  
MetClean(data = "data.csv",   
 sample.information = "sample.information.csv",  
 polarity = "positive",   
 obs.zero.cutoff = 0.5,  
 var.zero.cutoff = 0.5,  
 method = "svr",  
 threads = 2,   
 mz.tolerance = 30,  
 rt.tolerance = 180,  
 met.plot = TRUE)

### 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"。

Figure2 Data organisation of MetCleaning

### 对于那些可以超过零值比例的样品，可以选择是否删除掉。

