论文

# 目录

Placeholder

## 0.1 实验材料

## 0.2 实验方法

## 0.3 MCnebula R包概览

### 0.3.1 设计理念

### 0.3.2 数据流

### 0.3.3 可视化：Parent-Nebula和Child-Nebulae

## 0.4 MCnebula的算法

### 0.4.1 整体考虑

### 0.4.2 化学结构式和分子式

### 0.4.3 根据最佳候选项确立Reference

### 0.4.4 化学分类学

### 0.4.5 ABC选择算法

### 0.4.6 Cross filter stardust Classes的细节

#### 0.4.6.1 Cross filter by ‘quantity’ (abundance selection).

#### 0.4.6.2 Cross filter by ‘score’\* (Goodness assessment)

#### 0.4.6.3 Cross filter by ‘identical’ (identicality assessment).

## 0.5 数据结构

### 0.5.1 首要Class: ’mcnebula’的结构

### 0.5.2 数据相关Class的结构

### 0.5.3 可视化相关Class的结构

### 0.5.4 其他Class

## 0.6 方法（Method）和函数（Function）

### 0.6.1 数据方法

### 0.6.2 可视化方法

### 0.6.3 其他方法和函数

## 0.7 分析工作流

## 0.8 实验材料

## 0.9 实验方法

## 0.10 MCnebula的评估

### 0.10.1 功能评估

### 0.10.2 归类准确度评估

### 0.10.3 鉴定准确度评估

## 0.11 MCnebula的拓展

### 0.11.1 用于代谢组数据分析

### 0.11.2 用于化学发现

## 0.12 实验材料

## 0.13 实验方法

## 0.14 实验材料

## 0.15 实验方法