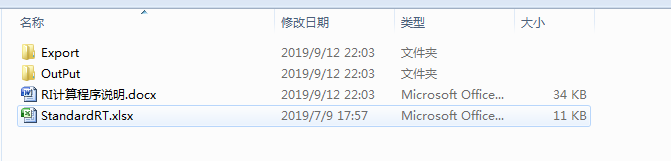
**RI计算程序说明：**

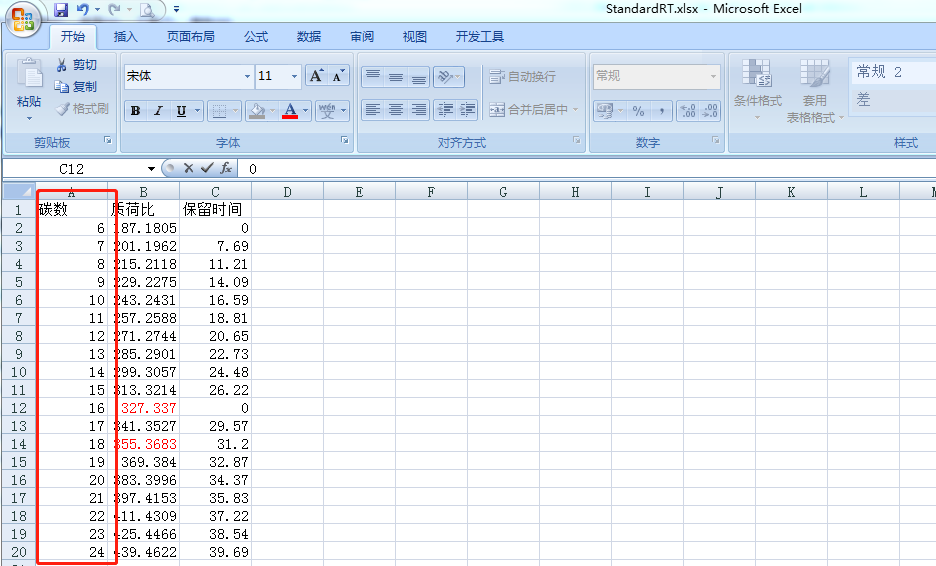
1. 文件准备：与程序在同一个文件夹里需要准备：

a、Export文件夹，里面放所有标品保留时间相差0.2以内的匹配过的文件，注意里面的文件不能处于打开状态，不然会报错（excel打开会有隐藏临时文件产生，程序会读到，但读不了数据，于是报错）。文件格式要求：第一行为名称，第二行开始为数字，前三列必须满足：第一列不为空

b、OutPut文件夹，此文件夹可以随意放文件，计算过的文件会全部放入这里。

c、命名为：StandardRI 的excel表格，其中一个表格命名为Standard，里面放标品的保留时间，第一列必须为连续的碳数（可以任意数字开始或者结束，但一旦开始就必须是连续的数字），第二列为保留时间（如果保留时间预计不可靠，则记为0，此时程序跳过此碳数，利用前后不为零的最近的两个保留时间进行计算，连续几个保留时间为零也可以）





红框里的数字必须连续

保留时间前面为零可以，但最后一个保留时间不要为零。

1. 默认的参数说明：



红框：文件夹的名字，可以更改，与实际文件夹名字保持一致即可。

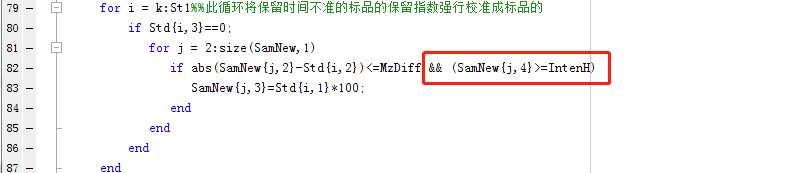
绿框：标品文件的文件名和表格名，可以更改，与实际文件夹名字保持一致即可。注意单引号的保留，更改后需显示为紫色（与图中颜色保持一致）。

蓝框：保留时间波动的范围，数据文件中质荷比匹配上后，如果保留时间和标品表格中对应碳数的时间的差值的绝对值小于它，则认为是这个标品。可以进行更改。MzDiff类似，根据需要更改。IntenH的值，用于存在峰拖尾冲顶情况，但没有提前检查过，设定值之后，可以在输出的表格中的Output表格中看提取出的保留时间，如果数据显示为零，而标品表格中不为零，则表示这个标品在这次运行中测得值超过了这个强度，并被视为保留时间不准，程序跳过了这个值，利用前后的标品保留时间进行计算。

然后点击运行即可。

\*\*注意：如果是因为峰强过高，导致保留时间没有被采用，则计算保留时间的时候会被强行校正为对应的标品的保留时间。

如果人为设定为零，但实际样品中有，且峰强不超过IntenH，则可以删去红框里的内容（在红框内容左边，输入%%，框内内容变为绿色即可）。



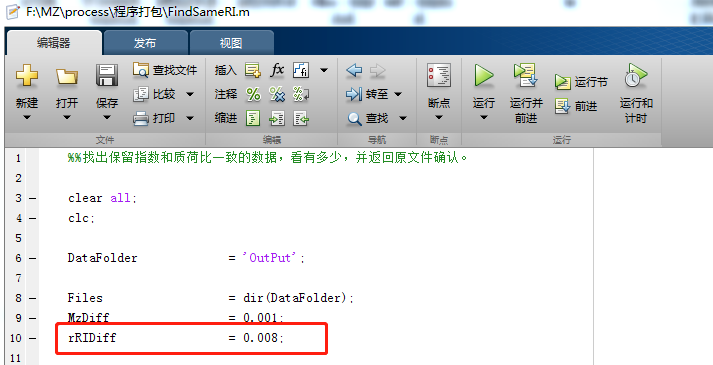
\*\*如果峰强全部正常，只是超过了IntenH，可将IntenH改大或者如上删掉红框。

如果一切正常，没有需要跳过的，程序即挨个利用保留指数进行计算。

**FindSameRI说明：**

有一个峰抽提成两个峰的，且有些相近的保留指数，会导致匹配的重复。

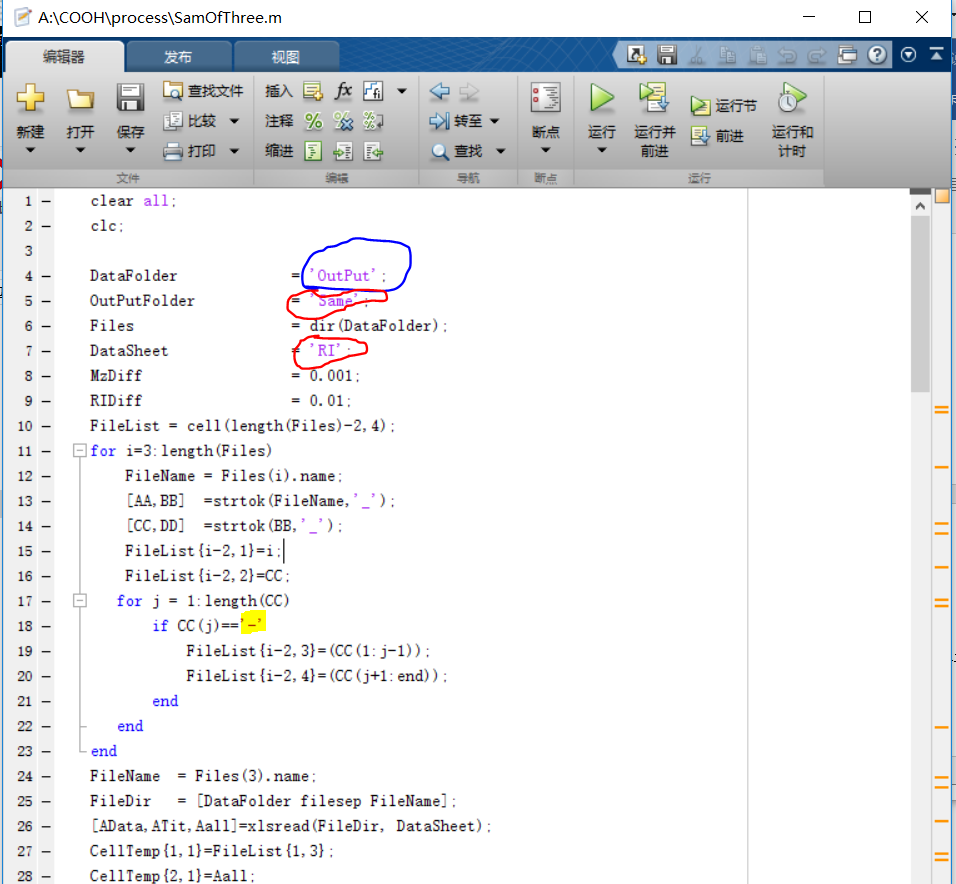
这个程序把保留指数在一定范围内的视为相似，然后找出来。



红框内改条件，这个参数是百分比，保留指数乘以该百分比得到的值以内的，视为相同的，汇总输出表格SameRI

几个平行之间找相同的部分

平行的命名需要有规律：如样本X号三个平行：X-1，X-2，X-3.

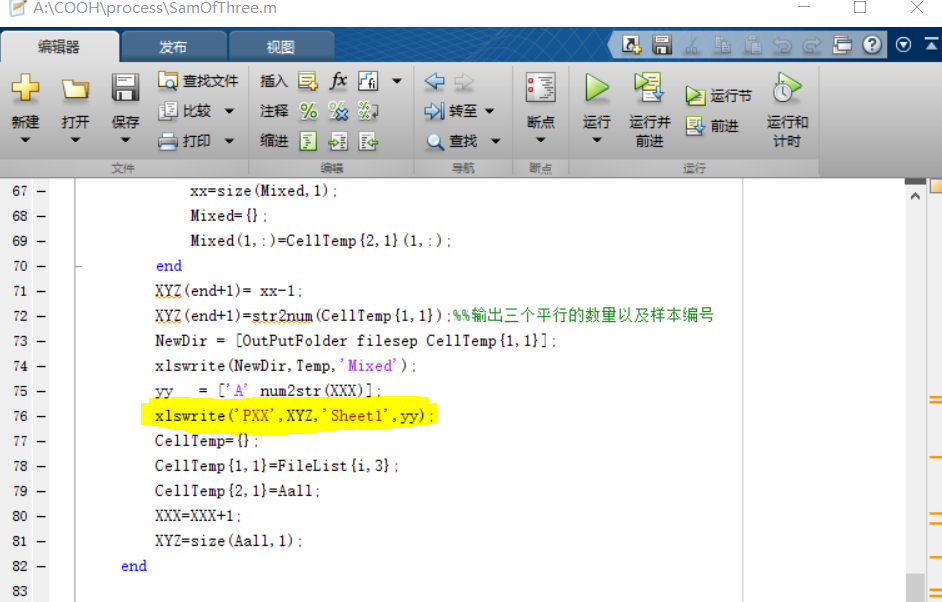


蓝圈里放所有平行的样本，可以是2个平行也可以是多个平行，随意。

此程序利用的是质荷比和保留指数来进行选择

待匹配文件夹不能有文件处于打开状态。

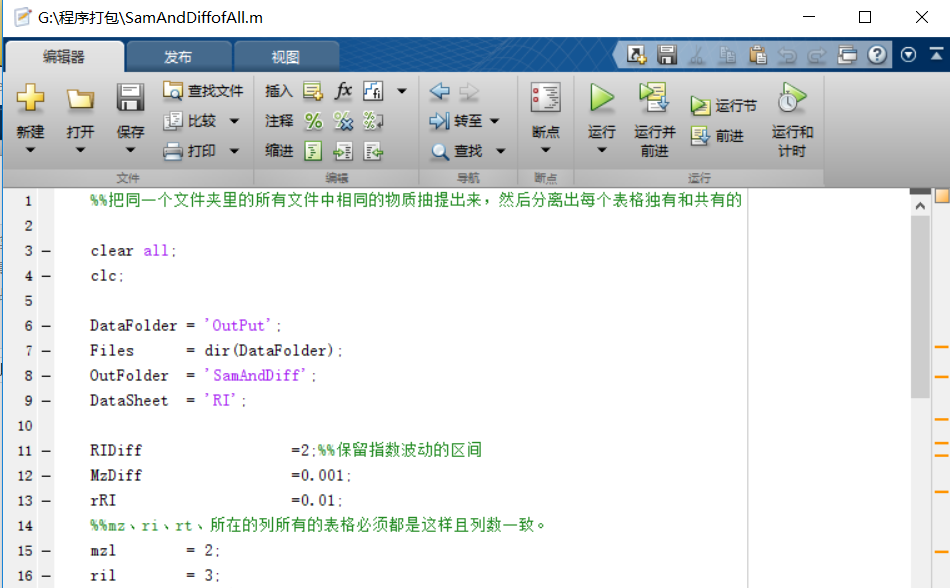
待匹配的文件里的数据存在RI表格名的表格里。

黄色重点显示的是样品名和它的平行编号之间的链接符号，可以是其他matlab能正确显示的符号。

黄色部分是程序运行后将输出的表格，表格名PXX，Sheet1中。把所有的表格有的数据个数和匹配后共有的数据个数进行输出，最后一列是样品名

此程序输出的表格会将所有的平行并列，以供检查。

找同一个文件夹里所有文件的相同和不同



数据文件放在OutPut里，输出的Diff在SamAndDiff里

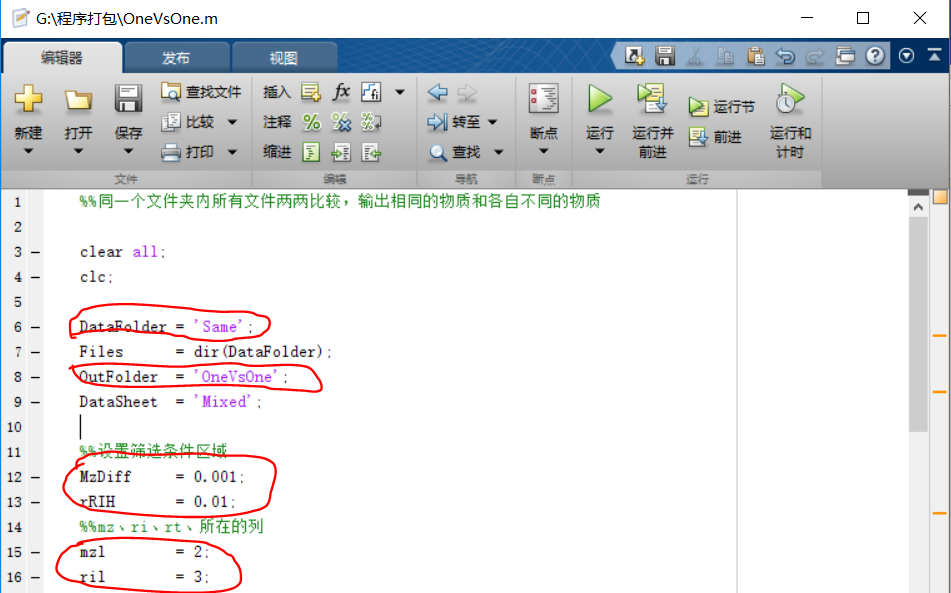
相同的数据在程序所在的文件夹里

质荷比在第二列，保留指数在第三列。

保留指数在百分之一范围内的视为相同。比例可更改。

**OnevsOne**

同一个文件夹的文件进行两两比较

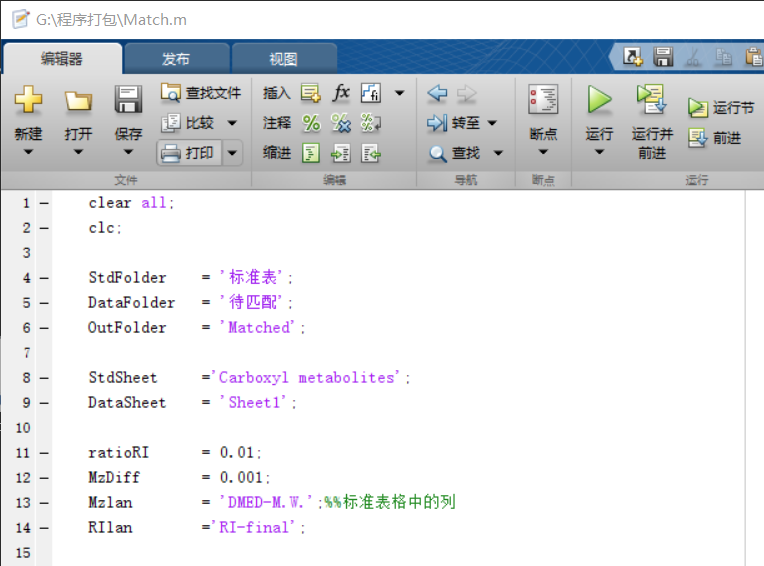


文件放在Same文件夹，或改第六行

输出文件夹如第八行

此处设定的筛选条件是保留指数的百分之一以内视为相同。

**Match说明：**



建三个文件夹，如4-6行

待匹配表格，数据要求在Sheet1里，或者改第九行。要求第二列为mz，第三列为ri，如果不是，则在第22，23行相应的更改。

标准品所有表格中，mz和RI列的名称必须一致，且表格名也必须一致，第8/13/14行可以进行更改。

11行改RI范围比例。

结果看同名表格里的‘标品名Matched’的结果即可。

MZMatch：

与Match的设置一致，用于已有的库，进行Mz的精确匹配，不涉及RI