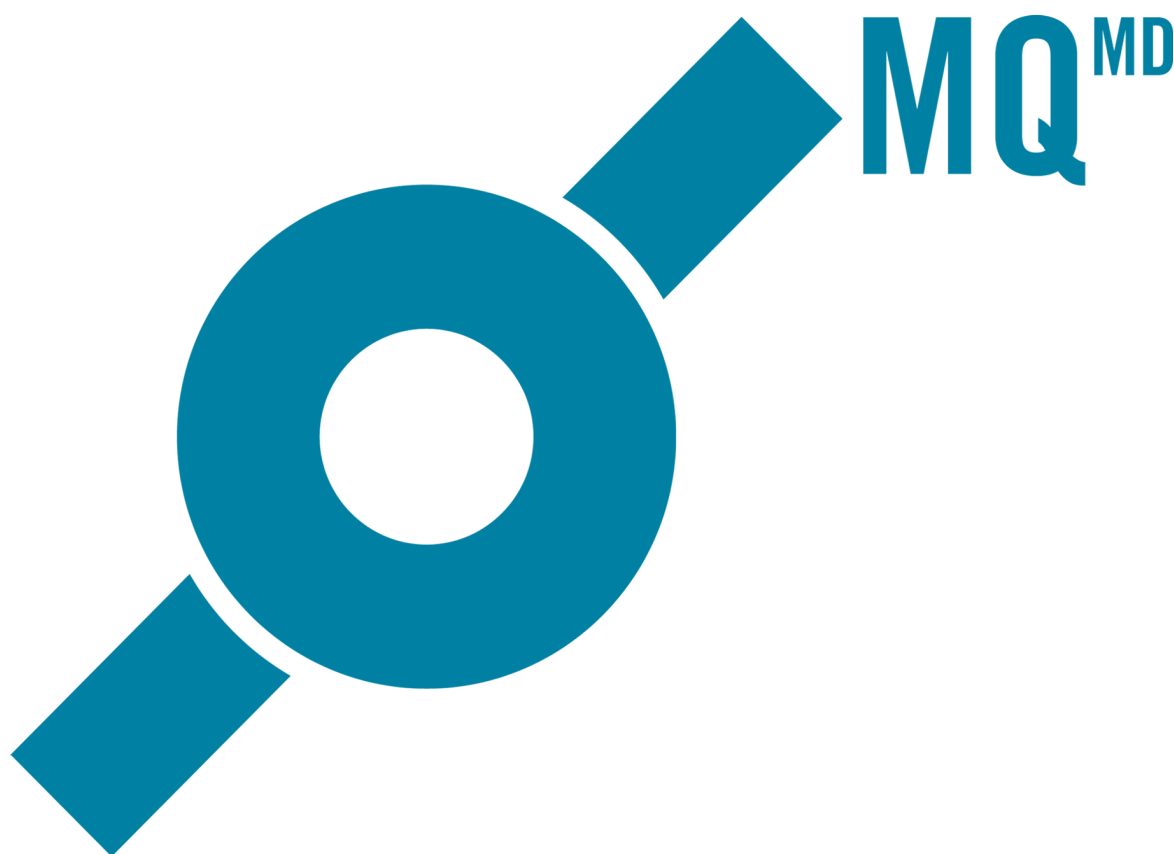

MultiQuant™ MD 3.0.3 软件

版本发布说明



本文件供已购买 SCIEX 设备的客户在操作此 SCIEX 设备时使用。本文件受版权保护，除非 SCIEX 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 SCIEX 提供以用于整合到 SCIEX 的设备中，并不意味着 SCIEX 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

SCIEX 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 SCIEX 的唯一且独有的表述、保证和义务。SCIEX 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

供体外诊断使用。

Rx only.

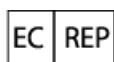
并非供与所有国家/地区。有关详细信息，请联系您的当地销售代表，或请查阅 sciex.com/diagnostics。

AB Sciex 采用 SCIEX 品牌开展业务。

本文件提及的商标属于 AB Sciex Pte. Ltd. 或其各自所有者的财产。

AB SCIEX™ 的使用经过许可。

© 2019 年 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.
1e Tochtweg 11,
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel
Netherlands



爱博才思有限公司 AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

IVD

CE

目录

- 1 版本发布说明.....4
 - 从 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1 改为版本 3.0.3.....4
 - MultiQuant™ MD 软件功能.....4
 - 安装说明.....5
 - 使用 DVD 光盘安装的先决条件.....5
 - 软件的其他要求.....6
 - 安装软件.....6
 - 删除软件.....7
 - 使用注意事项.....7
 - 已知问题和局限.....8
 - 从 3.0.2 版本更改为 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1.....8
 - 从 3.0.1 版改为 3.0.2 版.....9
 - 从 3.0 版改为 3.0.1 版.....10
 - 技术支持.....10
 - 其它文档.....10
 - 联系我们.....11
 - 技术支持.....11
- 修订历史记录.....12

从 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1 改为版本 3.0.3

新功能

- MultiQuant™ MD 3.0.3 软件支持 Microsoft Windows 10 (64 位) 操作系统。
- MultiQuant™ MD 3.0.3 软件支持 Microsoft Office 2016。
- MultiQuant™ MD 3.0.3 软件目前在 MRM1 行中显示 MRM2/MRM1 的实际比率和预计比率。
- MultiQuant™ MD 3.0.3 软件现在支持将额外的列转移到 LIMS。
- MultiQuant™ MD 3.0.3 软件现在可记住正在检查的样本，并且当用户导航到不同分析物时，光标会停留在该样本上。

已经解决的问题

Scheduled MRM Pro 极性转换数据处理问题

问题 MQ-2512 已修复。在此之前，用户无法处理 Scheduled MRMPRO 极性转换数据。

无法对非等间隔完全扫描数据中的离子正确求和

问题 MQ-2513 已修复。无法对非等间隔完全扫描数据中的离子正确求和。在对数据类型（如 TOF IDA 或 Scheduled MRM HR）执行求和离子计算，求和得出的峰面积可能大于预计值。

在升级 MultiQuant™ MD 软件时，鼠标光标会闪烁

问题 MQ-2801 已修复。在将软件升级到 MultiQuant™ MD 3.0.2 版本或 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1 时，就会遇到鼠标光标闪烁的问题。

MultiQuant™ MD 软件功能

MultiQuant™ MD 软件是旨在处理 SCIEX 仪器数据的定量软件包。MultiQuant™ MD 软件集成了众多新功能，这些功能在 Analyst® MD 软件定量模块中并未提供。

- 能够从多个批次和多个 wiff 文件添加样本。
- 更快，更好：速度提高：
 - 导航更快：MultiQuant™ MD 软件的用户界面设计已得到改进，包括行选择的醒目提示以及多成份样本的样本分配速度更快。
 - 积分更快：采用新版本 Analyst® MD 软件积分算法 MQ4 进行积分，对于大型 MRM 数据集合的运算速度显著加快，从而使用户能够迅速检查和编辑数据。

- 引入 SignalFinder™ 积分算法
 - SignalFinder 积分算法是随 MultiQuant™ MD 3.0 软件引入的全新积分算法。通过使用参考光谱的色谱峰建模功能，该算法可以获得相当准确的结果，减少了对数据进行手动积分或反复调整数据参数的情况。
 - 动态范围扩展在 SignalFinder™ 积分算法中得以实现，从而可以在检测器饱和占主导的情况下，将样本的动态范围上限提高达 30 倍。
- MultiQuant™ MD 高级审核记录软件
MultiQuant™ MD 3.0 软件重新定义了样本定量的审核记录体验。它提供了快速导航工具、相同屏幕的积分差异比较以及审核记录条目。
 - 搜索：MultiQuant™ MD 软件让用户能够通过审核记录迅速而有效地进行过滤。
 - 对积分数据的“事先和事后”检查：通过单击审核记录中的某个样本，用户马上就可以看到改动前和改动后的积分色谱图。
- 结果表锁定和快速电子签名
 - 对色谱峰进行积分后，用户可以将结果表锁定。只有具备相应角色权限的用户才可以将被锁定的结果表解锁。不过，QC 审核员还可以在审核记录中记下自己对结果表的评注。这样就可以强化不同角色的分工，从而确保在审核过程中，没有经过相应的批准之前不会随便改动。
 - 对于积分改动的电子签名是统一的，这使得改动色谱图的事件集合对应一个电子签名，而不是对每一个改动使用多个电子签名。

安装说明

使用 DVD 光盘安装的先决条件

需要满足如下条件才可安装并运行 MultiQuant™ MD 软件。登录用户必须是安装软件的计算机的管理员。对于 Microsoft Windows 7 和 Windows 10 操作系统，User Account Control（用户账户控制）设置项必须设为“Never notify（永不通知）”。

- Windows 7 SP1（32 或 64 位）或 Windows 10（64 位）操作系统
- Analyst® MD 1.6.1 软件（在 Windows 7（32 位）操作系统上）
- Analyst® MD 1.6.2 软件（在 Windows 7（32 位和 64 位）操作系统上）
- Analyst® MD 1.6.3 软件（在 Windows 7（32 位和 64 位）和 Windows 10（64 位）操作系统上）
- .NET Framework 3.5（SP1 或更高版本）

注释：在 Windows 7 操作系统中，.NET 3.5 SP1 已默认安装。在 Windows 10 操作系统上，如果在安装 MultiQuant™ MD 3.0.3 软件之前未安装 .NET 3.5 SP1，则系统会通知用户，.NET 3.5 SP1 未安装，应在当前安装完成后执行此安装。用户应联系其 IT 部门安装 .NET 3.5 SP1。请参阅图 1-1。

软件的其他要求

- 仅支持英文版 Windows 7 SP1 操作系统和 Windows 10 操作系统。数字、货币、日期和时间格式必须设为英语（美国）。将格式设置为其他值可能会导致数据出错。
- 要求安装 Microsoft Office 2010、2013 或 2016，用于生成或修改报告。

安装软件

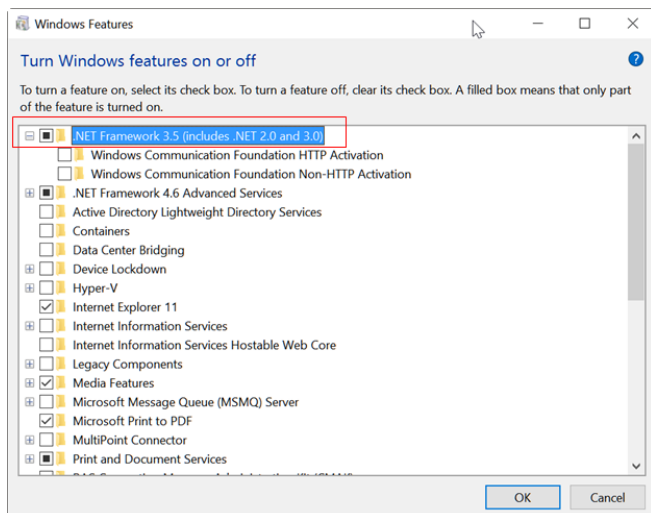
注释： 如果正在从 MultiQuant™ MD 3.0.2 软件（带热补丁 1）升级到 MultiQuant™ MD 3.0.3 软件，则在安装 MultiQuant™ MD 软件执行的峰值积分的正确性。请参阅 MultiQuant MD MultiQuant™ MD 部分。

1. 运行 setup.exe 文件。
2. 激活许可证。
3. 在 Windows 10 操作系统上，如果计算机上尚未安装 .NET 3.5，则在 Control Panel（控制面板）> Programs and Features（程序和功能） 中选择 Turn Windows features on or off（打开或关闭 Windows 功能）。

Windows Features（Windows 功能）对话框随即打开。

4. 选择 .NET Framework 3.5 选项以开始安装 .NET 3.5。您可能需要 IT 权限才能执行此操作。

图 1-1 Windows Features（Windows 功能）对话框



5. 安装后，确认 .NET 3.5 存在于 Windows Features（Windows 功能）对话框中。如果已安装，则选择 .NET Framework 3.5 选项。

删除软件

删除 MultiQuant™ MD软件，之后再删除 Analyst® MD软件。

1. 打开 Control Panel（控制面板）。
2. 请根据操作系统，按以下步骤操作：

Windows 7 或 Windows 10 操作系统
单击 Programs（程序）或 Programs and Features（程序和功能），然后单击 Uninstall a program（卸载程序）。
单击 MultiQuant MD 3.0.x。
单击 Uninstall（卸载）。

删除期间，系统会提示您删除 MultiQuant™ MD软件的配置文件。如果您计划稍后在此计算机上重新安装 MultiQuant™ MD软件，则保留配置文件。

使用注意事项

- MultiQuant™ MD软件仅集成在 Analyst® MD软件 Scheduled MRM 算法采集方法。对于 Scheduled MRM使用动态窗口扩展处理数据，MultiQuant™ MD软件会集成从检测窗口开始到其停止的峰，即从 $RT - 0.5 \text{ DetectionWindow}$ 到扩展窗口停止位置，最大为 $RT + 1.5 \text{ DetectionWindow}$ 。针对每个离子对的检测窗口开始和停止位置可能不是采集的开始和停止位置。
- MultiQuant™ MD 在处理超过 100 000 行的 Results Table（结果表）时可能会间歇性停止。为避免出现此类情况，我们建议处理减少的样本，以创建包含少于 100 000 行的 Results Table（结果表）。
- 在使用网络采集方式采集数据的同时处理数据文件，可能会导致冲突错误。为避免这些错误，建议对每个 wiff 文件使用一次加注。
- 含有 100 000 行以上的结果表可能需要至少 4 GB RAM 的计算机内存。
- 如果用户将计算机上的日期改成许可证到期日之后的日期，然后又试图将其改回当前日期，许可证文件就会损坏。
- 仅支持英文操作系统。
- 如果工作站上未安装 Microsoft Office，则报告功能将被隐藏。
- 为确保报告的正确生成，请在定量方法的 Components（成份）表中，将所有分析物列在表上方，将所有内标物列在表下方。同组的分析物必须按正确的顺序列在一起。在定量方法中，不同组不能混合。如果不同的组混在一起，则报告内的列就不能对齐。软件不支持在定量方法中将经过分组和未分组的分析物混在一起。所有分析物都要分组，或者都不分组。
- 如果用户在 MultiQuant™ MD软件中更改活动项目，然后返回到 Analyst® MD软件，则必须从 Project（项目）列表中选择新的活动项目。如果项目用 MultiQuant MD 软件改动过，那么 Analyst MD 软件项目就不会自动更新。

已知问题和局限

- 向下填充功能 Ctrl + D 不能作用于可编辑的列，如 Actual Conc（实际浓度）和 Dilution Factor（稀释系数）。为避免出现此问题，请交换 Actual Conc（实际浓度）列与 Outlier Reason（离群值原因）列的位置，同时交换 Dilution Factor（稀释系数）与 Retention Time（保留时间）列的位置。（MQ-2305）
- 重新集成内标物（IS）并初次应用更改时，无法重新计算校准等式。下一次执行相同的更改并应用时，即可重新计算校准等式。此问题仅影响在校准曲线的 UI 中显示的校准等式。重新集成内标物时，结果始终会得到更新。（MQ-2782）
- 在 Windows 10 操作系统上，Installation Verification（安装验证）报告不会打开，而当用户尝试打印此报告时，会显示无法安装 pdfFactory 的消息。为避免出现此问题，请确保将计算机连接到网络。此问题不影响 Installation Verification（安装验证）功能。（MQ-3204）
- MultiQuant™ MD 软件显示错误消息，表明使用 Create Report（创建报告）和 Save Results Table（保存结果表）菜单项，根据从另一台计算复制的已锁定 Results Table（结果表）尝试生成报告时，无法完成该操作。作为一种解决方案，可解锁当前计算机上已锁定的 Results Table（结果表），然后再次锁定。接下来创建报告。

注释： 在此情况下，无法使用 Analyst® MD 软件创建报告，因为 Analyst® MD 软件用户没有解锁 MultiQuant™ MD 软件 Results Table（结果表）的所需权限。

（MQ-1369）

- 避免对采集文件中的自定义列使用与 MultiQuant™ MD 软件 Results Table（结果表）中的列相同的名称。如果使用了相同的名称，那么自定义列中的信息便无法在结果表中读取。除了 MultiQuant™ MD 软件中列出的列之外，Reference Guide（参考指南）、Barcode（条形码）和 Scanned Barcode（已扫描条形码）也只能由 MultiQuant™ MD 软件使用，不得用于采集方法中。列名称不区分大小写。（MQ-345）
- 仅当在定量方法中对离群值标记使用浓度上限时，未发现峰和在结果表中显示为 N/A 的样品的浓度标记不正确。（MQ-548）
- 在 Analyst® MD 软件中被指定为分析员角色的本地用户无法将 Results Tables（结果表）保存到已拒绝删除权限的文件夹中。如果用户想要导出并保存结果表，他们有两种选择：他们可以将结果表导出到硬盘上的另一位置，或者可以选择相同位置并使用相同文件名，然后重新保存文件。（MQ-600）
- 如果将含浓度单位为空字段的定量方法导出为文本文件，然后作为文本导入，则使用 Units and Calibration Defaults（单位和校准默认值）对话框中指定的值填充浓度单位。建议用户在保存前确认方法中所含信息全部正确。（MQ-614）

从 3.0.2 版本更改为 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1

MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1 解决了如下问题：

多离子加总问题

问题 MQ-2009 已修复。之前，某些样本的累计峰面积大于个别离子的峰面积实际值之和。累计峰面积现已与实际峰面积之和一致。

处理速度操作改进

问题 MQ-1895 已修复。之前，MultiQuant™ MD 3.0.2 软件中的手动集成速度慢于 MultiQuant™ MD 3.0.1 软件的手动集成速度。安装该 HotFix 之后，执行速度现在可达到与 3.0.1 版相似的速度。

手动集成问题

问题 MQ-549 已修复。之前，在叠加模式中显示分析物色谱图时，如果为色谱图的强度轴选择了“百分比 Y 轴”，将发生不正确的手动集成。现在可以正确进行手动集成。

从 3.0.1 版改为 3.0.2 版

新功能

- 本软件目前可显示所有样品类型（包括内标物）的色谱离子率。
- 本软件目前可在结果表中显示所有样品类型的预期离子率和计算离子率。 本软件还可标记出预期离子率不符合规范的样品。
- 实现了对含查询报告的支持。
- 实现了对 Word、csv 和 HTML 格式报告的支持。
- 添加了两个报告标签：查询名称和报告模板名称。
- 实现了以文本导入定量方法。
- 实现了以文本导出定量方法。
- 添加了新报告及相关查询：含浓度阈值的样品报告。

已经解决的问题

- 在创建结果表之后，用户不得从结果表中移除内标物，因为未在删除之后重新计算结果。如果用户想要移除内标物，则在删除内标物后保存结果表，然后关闭并重新打开结果表。（MQ-382/493）这一问题目前已修复。
- 请勿使用 Process（处理）菜单下的 Export Calibration and Save Results Table（导出校准并保存结果表）或 Import External Calibration（导入外部校准）功能。（MQ-387）这一问题目前已修复。
- 当用户在应用外部校准后创建报告时，Calculated Concentration（计算浓度）列不应变化。 该列应保持在生成报告之前所存在的相同值。（MQ-379）这一问题目前已修复。
- 可以导出定量方法，但不能导入相同的定量方法。 不能将含有浓度上限超过 100 的定量方法导入软件。（MQ-389）这一问题目前已修复。

- 对于在 3.0.1 版或更早版本中创建的结果表，即使重新处理结果，仍然对小于 0.3 的值的
高斯光滑应用之前的行为。所有小于 0.3 的高斯光滑值的换算系数不正确。(MQ399) 在
MultiQuant™ MD 3.0.2 软件中创建的新 Results Tables (结果表) 已修复此问题。如果在
处理中应用小于 0.3 的高斯光滑值，则建议使用 MultiQuant™ MD 软件创建 Results Tables
(结果表) 并重新处理数据。
- 离子率离群值标记不适用于质量控制样品。(MQ-282) 这一问题目前已修复。

从 3.0 版改为 3.0.1 版

注释：从 3.0 版升级到 3.0.1 版时无需其他许可证激活步骤。

下列问题已修复。

- 当管理员向 Security Configuration (安全配置) 中添加用户组、然后将用户组与
MultiQuant™ MD 软件连接时，这些用户无法运行 MultiQuant™ MD 软件。只有被作为个人
用户添加到 Security Configuration (安全配置) 中的用户才能运行 MultiQuant™ MD 软
件。该问题现已修复。(MQ-283)
- 用户现在可以将相关系数 (r 值) 另作一列导出到文本文件中。(MQ-291)
- 已增加对报告中的黑白图片支持。(MQ-292)
- 在此之前，在审核记录中选中“放弃改动”选项的情况下，创建的报告会被删除。该问题
现已修复。(MQ-289)
- 色谱图报告中的轴线标识过小，很难读取。现在用户可以在模板编辑器中设定每个图片标
签的轴线和色谱峰标识的字号。(MQ-294)
- 在创建结果表后，如果用户使用了 Edit Results Table Method (编辑结果表) 选项更新了
方法，然后重新设置了新的典型样本，在这种情况下，如果有化合物使用了相同的 MRM 转
换，则第一种化合物的 Q1/Q3 转换将被用于后面的化合物。新的典型样本是来自另一个
.wiff 文件的样本，该文件采集了相同的化合物，但顺序不同。该问题现已修复。(MQ-342)
- 在之前的版本中，如果以下条件均符合，结果表就会显示错误数据：
 - 选择了 Cache Chromatograms for Faster Peak Review (缓存色谱图以加快色谱峰检查
速度) 复选框。
 - 用于创建结果的数据文件名称相同，并被保存在独立文件夹中。
 - 用户使用结果表向导同时创建了多个结果表。
本版本解决了这个问题，这样在上述情况下就不会再出现结果表中数据错误的情况。
(MQ-297)

技术支持

其它文档

请参照随软件提供的文档。

联系我们

SCIEX 支持

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

客户培训

- 北美地区 NA.CustomerTraining@sciex.com
- 欧洲 Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 欧盟与北美以外地区，请访问 sciex.com/education 获取联系信息。

在线学习中心

- SCIEXUniversity

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南，请访问 sciex.com/productsecurity。

技术支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。详情请访问 SCIEX 网站 sciex.com。

修订历史记录

版本	更改原因	日期
A	文件首次发布。	2013 年 9 月
B	添加了“从 3.0 版改为 3.0.1 版”。添加了 MQ-342 期。	2014 年 8 月
C	添加了“从 3.0.1 版改为 3.0.2 版”。更新了已知问题和局限。删除对 Analyst 管理员控制台的引用。	2015 年 1 月
D	在需要时将 AB SCIEX 更改为 SCIEX。更新了版权页面。将公司徽标更改为 Sciex Diagnostics。添加了“从 3.0.2 版本更改为 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁 1”。添加了“从 MultiQuant™ MD 3.0.2 热补丁更改为 3.0.3 版本”。更新了“使用 DVD 光盘安装的先决条件”、“软件的其他要求”、“安装软件”、“删除软件”和“已知问题和局限”。	2017 年 6 月
E	在版权页上更新生产地址。	2019 年 1 月