
MultiQuant™ MD

Notas de versão



Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

IVD

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir o software de ser desmontado, passar por engenharia reversa ou decompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou os seus produtos, que podem conter peças cujos nomes estão registrados como marcas registradas e/ou funcionam como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

CE

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A SCIEX não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

Para uso em diagnóstico in vitro.

Rx only.

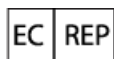
Não disponível em todos os países. Entre em contato com um representante da SCIEX para detalhes.

A AB Sciex está fazendo negócios como SCIEX.

As marcas registradas mencionadas aqui são propriedade da AB Sciex Pte. Ltd. ou seus respectivos proprietários.

AB SCIEX™ está sendo usada sob licença.

© 2017 AB Sciex



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



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, n.º 04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPORE 739256

Conteúdo

1 Notas de versão.....	4
Alterações do MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1 para a versão 3.0.3.....	4
MultiQuant™ MD Recursos do software.....	4
Instruções de instalação.....	5
Pré-requisitos para instalação usando o DVD.....	5
Requisitos adicionais do software.....	6
Instalar o software.....	6
Remover o software.....	7
Observações sobre o uso.....	7
Limitações e problemas conhecidos.....	8
Alterações da versão 3.0.2 para MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1.....	9
Alterações da versão 3.0.1 para a versão 3.0.2.....	10
Alterações da versão 3.0 para a versão 3.0.1.....	11
Suporte.....	12
Documentação adicional.....	12
Fale conosco.....	12
Suporte técnico.....	12
Histórico de revisão.....	13

Alterações do MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1 para a versão 3.0.3

Novos recursos

- O software MultiQuant™ MD 3.0.3 suporta o sistema operacional Microsoft Windows 10 (64-bit).
- O software MultiQuant™ MD 3.0.3 suporta o Microsoft Office 2016.
- O software MultiQuant™ MD 3.0.3 não exibe a relação real e a relação esperada de MRM2/MRM1 na linha para MRM1.
- O software MultiQuant™ MD 3.0.3 agora suporta a transferência de colunas adicionais para LIMS.
- O software MultiQuant™ MD 3.0.3 agora memoriza a amostra a ser revisada e o cursor fica naquela amostra quando o usuário navega para um analito diferente.

Problemas solucionados

***Scheduled* MRM Pro.**

O problema MQ-2512 é solucionado. Anteriormente, os usuários não eram capazes de processar os dados com polaridade trocada do *Scheduled* MRM Pro.

Somar íons a partir de dados de uma varredura total de íons desigualmente espaçada que não funciona corretamente

O problema MQ-2513 é solucionado. Somar íons a partir de dados de uma varredura total de íons desigualmente espaçada não estava funcionando corretamente. Ao realizar o cálculo de íons somados para um tipo de dados como TOF IDA ou *Scheduled* MRM HR, a área do pico somada pode ser maior do que o valor esperado.

O cursor do mouse estava piscando ao atualizar o software MultiQuant™ MD.

O problema MQ-2801 é solucionado. Ao atualizar o software para a versão MultiQuant™ MD 3.0.2 ou MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1, o problema de cursor do mouse piscando foi apresentado.

MultiQuant™ MD Recursos do software

O software MultiQuant™ MD é um pacote de quantificação desenvolvido para processar dados do instrumento SCIEX. O software MultiQuant™ MD incorpora diversos novos recursos adicionais que não estavam disponíveis no módulo Quantitation do software Analyst® MD.

- Capacidade de adicionar amostras de múltiplos lotes e múltiplos arquivos wiff.

- **Mais rápido, melhor: melhorias na velocidade:**
 - **Navegação mais rápida:** o design da interface do usuário para o software MultiQuant™ MD foi melhorada, resultando em uma navegação mais rápida, incluindo sugestões visuais para a seleção de linha e atribuição mais rápida da amostra para amostras multicomponentes.
 - **Integração mais rápida:** a integração usando a versão mais recente do algoritmo de integração do software Analyst® MD, MQ4, é significativamente mais rápida para grandes conjuntos de dados de MRM, permitindo que os usuários revisem e editem os dados mais rapidamente.
- **Introdução do algoritmo de integração SignalFinder™**
 - O **algoritmo de integração SignalFinder** é um novo algoritmo de integração introduzido com o software MultiQuant™ MD 3.0. Ao usar as capacidades de modelamento de pico usando um espectro de referência, esse algoritmo é capaz de atingir resultados impressionantes, minimizando a necessidade de integração manual dos dados ou ajustando os parâmetros de dados.
 - A **extensão dinâmica do intervalo** é alcançada no algoritmo de integração SignalFinder™ para estender o intervalo dinâmico superior de um conjunto de amostra em até 30 vezes durante os casos em que a saturação do detector predomina.
- **MultiQuant™ MD Software avançado de rastreamento de auditoria**

O software MultiQuant™ MD 3.0 redefine a experiência de rastreamento de auditoria para quantificação. Fornece ferramentas de navegação mais rápidas e comparações da diferença de integração na mesma tela junto às entradas de rastreamento de auditoria.

 - **Pesquisa:** o software MultiQuant™ MD fornece aos usuários a capacidade de filtrar por meio do rastreamento de auditoria de forma rápida e efetiva.
 - **Revisão de integração dos dados “antes e depois”:** ao clicarem em uma amostra no rastreamento de auditoria, os usuários imediatamente visualizam os cromatogramas integrados de antes e depois de a alteração ser feita.
- **Bloqueio da tabela de resultados e assinaturas eletrônicas rápidas**
 - Após a integração dos picos, o usuário pode bloquear a tabela de resultados. Apenas um usuário com a atribuição de função correta pode desbloquear a tabela de resultados depois que é bloqueada. No entanto, um revisor de QC ainda pode registrar comentários sobre a tabela de resultados no rastreamento de auditoria. Isso efetiva a separação de funções e garante que alterações não sejam feitas no processo de revisão sem a devida aprovação.
 - As assinaturas eletrônicas em alterações de integrações são consolidadas, de forma que uma única assinatura eletrônica sirva para um conjunto de eventos que muda um cromatograma, em vez de ter múltiplas assinaturas para cada alteração.

Instruções de instalação

Pré-requisitos para instalação usando o DVD

Os seguintes itens são necessários para instalar e executar o software MultiQuant™ MD. O usuário logado deve ser um administrador do computador para instalar o software. Para os sistemas operacionais Microsoft

Notas de versão

Windows 7 e Windows 10, a configuração de controle da conta do usuário deve ser definida para "Never notify".

- Sistemas operacionais Windows 7 com SP1 (32 ou 64-bit) ou Windows 10 (64-bit)
- Software Analyst[®] MD 1.6.1 (no sistema operacional Windows 7 (32-bit))
- Software Analyst[®] MD 1.6.2 (nos sistemas operacionais Windows 7 (32 ou 64-bit))
- Software Analyst[®] MD 1.6.3 (nos sistemas operacionais Windows 7 (32 e 64-bit) e Windows 10 (64-bit))
- .NET Framework 3.5 (SP1 ou mais recente)

Nota: No sistema operacional Windows 7, o .NET 3.5 SP1 é instalado por padrão. No sistema operacional Windows 10, se o .NET 3.5 SP1 ainda não tiver sido instalado antes da instalação do software MultiQuant[™] MD 3.0.3, o usuário é informado que o .NET 3.5 SP1 não está instalado e deve ser instalado após a instalação ser concluída. Os usuários devem contatar o seu departamento de TI para instalar o .NET 3.5 SP1. Consulte [Figura 1-1](#).

Requisitos adicionais do software

- Apenas as versões em inglês do sistema operacional Windows 7 com SP1 e do Windows 10 são suportadas. O formato de números, moedas, datas e tempo deve ser configurado para inglês (Estados Unidos). Configurar o formato para um valor diferente pode resultar em dados errados.
- O Microsoft Office 2010, 2013 ou 2016 é necessário para gerar ou modificar relatórios.

Instalar o software

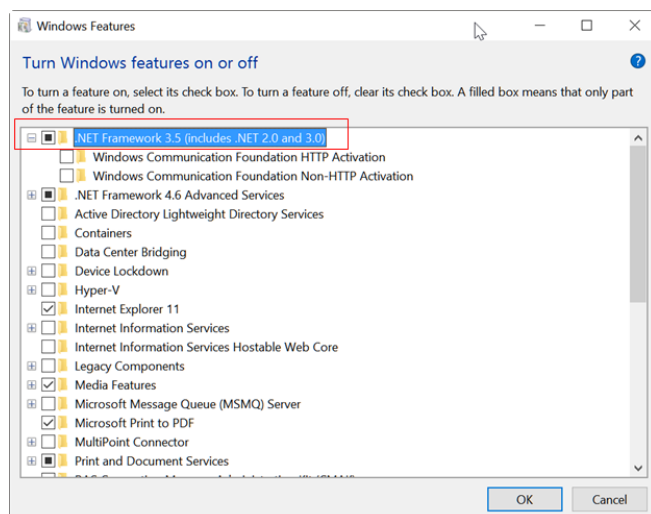
Nota: Se você está atualizando para o software MultiQuant[™] MD 3.0.3 a partir do software MultiQuant[™] MD 3.0.2 com HotFix 1, primeiro remova o hotfix antes de instalar o software MultiQuant[™] MD. Consulte a seção *Remover o HotFix* nas Notas de versão do *MultiQuant[™] MD 3.0.2 HotFix 1*.

1. Execute o arquivo **setup.exe**.
2. Ative a licença.
3. No sistema operacional Windows 10, se o .NET 3.5 ainda não estiver instalado no computador, em **Control Panel > Program and Features**, selecione **Turn Windows features on or off**.

A caixa de diálogo Windows Features é aberta.

4. Selecione a opção **.NET Framework 3.5** para habilitar a instalação do .NET 3.5. Você pode precisar da permissão de TI para fazer isso.

Figura 1-1 Caixa de diálogo Windows Features



5. Após a instalação, confirme a presença do NET 3.5 na caixa de diálogo Windows Features. Se estiver instalado, a opção **.NET Framework 3.5** estará selecionada.

Remover o software

Remova o software MultiQuant™ MD antes de remover o software Analyst® MD.

1. Abra o **Control Panel**.
2. Continue conforme segue, dependendo do sistema operacional:

Sistema operacional Windows 7 ou Windows 10
Clique em Programs ou Programs and Features e depois clique em Uninstall a program .
Clique em MultiQuant MD 3.0.x .
Clique em Uninstall .

Durante a remoção, é solicitado que você remova os arquivos de configuração do software MultiQuant™ MD. Se você pretende reinstalar o software MultiQuant™ MD nesse computador posteriormente, mantenha os arquivos de configuração.

Observações sobre o uso

- A documentação do software MultiQuant™ MD apenas integra picos dentro da janela de detecção definida no método de aquisição do algoritmo Scheduled Analyst® MD do software *Scheduled* MRM. Para dados do *Scheduled* MRM Pro que usam uma extensão da janela dinâmica, o software MultiQuant™ MD integra picos a partir de onde as janelas de detecção se iniciam até onde elas param, ou seja, da RT - 0.5 DetectionWindow até onde a janela estendida para, que é até RT + 1.5 DetectionWindow. O começo e o fim da janela de detecção para cada transição pode não ser onde a aquisição começa e termina.

- Intermitentemente, o software MultiQuant™ MD pode parar de funcionar quando uma tabela de resultados com mais de 100.000 linhas for processada. Para evitar tal situação, nós recomendamos processar menos amostras para criar uma tabela de resultados que contenha menos do que 100.000 linhas.
- Processar arquivos de dados enquanto estão sendo adquiridos usando a aquisição de rede pode gerar erros de conflito. Para evitar esses erros, recomenda-se usar uma única injeção por arquivo wiff.
- As tabelas de resultados que contêm mais de 100.000 linhas podem exigir um computador com pelo menos 4 GB de RAM.
- O arquivo da licença se corrompe se os usuários mudarem a data em seu computador para uma data posterior à data de vencimento da licença e depois tentarem mudar a data de volta para a data atual.
- Apenas sistemas operacionais em inglês são suportados.
- Se o Microsoft Office não for instalado na estação de trabalho, a funcionalidade de relato é oculta.
- Para se certificar de que relatórios sejam gerados corretamente, na tabela **Components** do método quantitativo, liste todos os analitos no topo da tabela e todos os padrões internos na parte inferior da tabela. Analitos do mesmo grupo devem ser listados juntos e na ordem correta. Grupos não podem ser misturados no método. Se os grupos são misturados, as colunas no relatório ficam desalinhadas. A mistura de agrupamento e de não agrupamento de analitos no método quantitativo não é suportada. Todos os analitos são atribuídos a grupos ou todos os analitos não são atribuídos a grupos.
- Se os usuários alterarem o projeto ativo no software MultiQuant™ MD e depois voltarem ao software Analyst® MD, o novo projeto ativo deve ser selecionado a partir da lista **Project**. A lista do projeto do software Analyst MD não é automaticamente atualizada quando o projeto é alterado usando o software MultiQuant MD.

Limitações e problemas conhecidos

- A função de preenchimento Ctrl + D não funciona nas colunas editáveis como Actual Conc. e Dilution Factor. Para evitar esse problema, troque a posição da coluna Actual Conc. com a Outlier Reason e a posição da coluna Dilution factor com a coluna Retention Time. (MQ-2305)
- A equação de calibração não é recalculada quando o padrão interno (IS) é reintegrado e as alterações são aplicadas pela primeira vez. Quando as mesmas alterações são realizadas e aplicadas na próxima vez, a equação de calibração é recalculada. Esse problema afeta apenas a equação de calibração exibida na UI da curva de calibração. O resultado é sempre atualizado quando o padrão interno é reintegrado. (MQ-2782)
- No sistema operacional Windows 10, o relatório Installation Verification não é aberto e uma mensagem sobre o pdfFactory não ter sido instalado é exibida quando o usuário tenta imprimir o relatório. Para evitar esse problema, certifique-se de que o computador esteja conectado à rede. Esse problema não afeta o recurso Installation Verification. (MQ-3204)

- O software MultiQuant™ MD mostra uma mensagem de erro de que a operação não pode ser concluída quando uma tentativa é feita de gerar um relatório, usando o item do menu **Create Report and Save Results Table**, de uma tabela de resultados bloqueada que foi copiada de outro computador. Como solução, desbloqueie a tabela de resultados bloqueado no computador atual e depois bloqueie-a de novo. Crie o relatório.

Nota: Um relatório não pode ser criado usando o software Analyst® MD em tal cenário porque os usuários do software Analyst® MD não têm a permissão necessária para desbloquear uma tabela de resultados do software MultiQuant™ MD.

(MQ-1369)

- Evite usar o mesmo nome para uma coluna personalizada no arquivo de aquisição e para uma coluna na Results Table do software MultiQuant™ MD. Se o mesmo nome for usado, as informações na coluna personalizada não são lidas na **Results Table**. Além das colunas listadas no Guia de referência do software MultiQuant™ MD, **Barcode** e **Scanned Barcode** também são exclusivamente usados pelo software MultiQuant™ MD e não devem ser usados no método de aquisição. O nome da coluna não diferencia caracteres maiúsculos e minúsculos. (MQ-345)
- Quando somente uma concentração Upper Limit para valores extremos de sinalização no método quantitativo for usada, quaisquer amostras sem pico determinado e exibidas como N/A na tabela de resultados são incorretamente sinalizadas para Concentration. (MQ-548)
- Os usuários locais que são designados para a função de analista no software Analyst® MD não podem exportar e salvar as tabelas de resultados para uma pasta que tenham as permissões para deletar negadas. Se os usuários quiserem exportar e depois salvar as tabelas de resultados, eles têm duas opções: podem exportar as tabelas de resultados para outro local no disco rígido ou podem selecionar o mesmo local e usar o mesmo nome de arquivo e depois salvar os arquivos novamente. (MQ-600)
- Se um método quantitativo que contenha campos vazios para as unidades de concentração for exportado no formato de um arquivo de texto e depois importado como texto, as unidades de concentração são preenchidas usando o valor especificado na caixa de diálogo Units and Calibration Defaults. É recomendado que o usuário confirme se todas as informações contidas no método estão corretas antes de salvar. (MQ-614)

Alterações da versão 3.0.2 para MultiQuant™ MD

3.0.2 HotFix 1

O MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1 resolve os seguintes problemas:

Problema em somar múltiplos íons

O problema MQ-2009 é solucionado. Anteriormente, a área do pico somada para algumas amostras era maior do que a soma dos valores reais das áreas do pico para os íons individualmente. A área do pico somada está agora alinhada com a soma das áreas do pico reais.

Melhorias na operação de velocidade de processamento

O problema MQ-1895 é solucionado. Anteriormente, a integração manual operava em uma velocidade mais baixa no software MultiQuant™ MD 3.0.2 quando comparada à velocidade da integração manual no software

MultiQuant™ MD 3.0.1. Quando o HotFix é instalado, a velocidade de desempenho se torna semelhante à velocidade de desempenho da versão 3.0.1.

Problema com a integração manual

O problema MQ-549 é solucionado. Anteriormente, uma integração manual incorreta ocorria quando um cromatograma de analito era exibido no modo overlay com a opção "percentage y-axis" selecionada para o eixo de intensidade do cromatograma. A integração manual está correta agora.

Alterações da versão 3.0.1 para a versão 3.0.2

Novos recursos

- O software agora mostra as Proporções de Íons no Cromatograma para todos os tipos de amostra, incluindo padrões.
- O software agora mostra a Proporção de Íons Esperada e a Proporção de Íons Calculada para todos os tipos de amostra na tabela de resultados. O software também sinaliza amostras que estão fora das especificações para a Proporção de Íons Esperada.
- Suporte habilitado para relatórios que contenham buscas.
- Suporte habilitado para relatórios em formato Word, csv e HTML.
- Adição de duas novas tags de relato: nome da busca e nome do modelo de relatório.
- Habilitada a importação do método quantitativo no formato de texto.
- Habilitada a exportação do método quantitativo no formato de texto.
- Adição de novo relatório e busca associada: relatório de amostra com limite de concentração.

Problemas solucionados

- Após uma tabela de resultados ser criada, os usuários não devem remover um padrão da tabela de resultados porque os resultados não são recalculados após a exclusão. Se os usuários quiserem remover um padrão, salve a tabela de resultados após deletar o padrão e depois feche e abra a tabela de resultados de novo. (MQ-382/493) Esse problema foi solucionado agora.
- Não use os recursos Export Calibration and Save Results Table ou Import External Calibration encontrados no menu Process. (MQ-387) Esse problema foi solucionado agora.
- Quando o usuário cria um relatório após a calibração externa ser aplicada, a coluna "Calculated Concentration" não deve ser alterada. A coluna deve manter os mesmos valores que foram apresentados antes do relatório ser gerado. (MQ-379) Esse problema foi solucionado agora.
- O método quantitativo pode ser exportado, mas o mesmo método não pode ser importado. Os métodos quantitativos que contêm um limite máximo de concentração que exceda 100 não podem ser importados no software. (MQ-389) Esse problema foi solucionado agora.

- Para tabelas de resultados que foram criadas na versão 3.0.1 ou mais antiga, o comportamento anterior para a suavização gaussiana para valores abaixo de 0,3 ainda é aplicado, mesmo se os resultados forem processados novamente. O fator de escala estava incorreto para todos os valores de suavização gaussiana abaixo de 0,3. (MQ399) Esse problema foi solucionado agora para novas tabelas de resultados criadas no software MultiQuant™ MD 3.0.2. Se os valores da suavização gaussiana abaixo de 0,3 foram aplicados durante o processamento, é aconselhado que se crie uma tabela de resultados usando o software MultiQuant™ MD e que se processe novamente os dados.
- Uma sinalização de valor extremo de proporção de íons não é aplicada a amostras de QC. (MQ-282) Esse problema foi solucionado agora.

Alterações da versão 3.0 para a versão 3.0.1

Nota: Nenhuma etapa adicional da ativação da licença é exigida ao atualizar da versão 3.0 para a versão 3.0.1.

Os problemas a seguir foram solucionados.

- Quando o administrador adiciona um grupo de usuário a Security Configuration e depois conecta esse grupo ao software MultiQuant™ MD, esses usuários não podem executar o software MultiQuant™ MD. Apenas os usuários que são adicionados a Security Configuration como um usuário individual podem executar o software MultiQuant™ MD. Esse problema foi solucionado agora. (MQ-283)
- Os usuários podem agora exportar o coeficiente de correlação (valor r) como uma coluna adicional no arquivo de texto exportado. (MQ-291)
- Suporte foi adicionado para figuras monocromáticas nos relatórios. (MQ-292)
- Anteriormente, um relatório criado era deletado quando a opção de descartar alterações no rastreamento de auditoria era selecionada. Esse problema foi solucionado agora. (MQ-289)
- A identificação do eixo no relatório do cromatograma é pequena demais e difícil de ler. Agora o usuário pode especificar o tamanho da fonte para a identificação do eixo e do pico no editor do modelo para cada tag de figura. (MQ-294)
- Se houver compostos que usam a mesma transição de MRM, a transição de Q1/Q3 para o primeiro composto é usada para os últimos compostos se, após criar uma **Results Table**, o usuário atualizar o método usando a opção **Edit Results Table Method** e redefinir a nova amostra típica. Uma nova amostra típica é uma amostra de outro arquivo .wiff com os mesmos compostos adquiridos, mas em uma ordem diferente. Esse problema foi solucionado agora. (MQ-342)
- Na versão anterior, dados incorretos eram exibidos na **Results Table** se todas essas condições fossem atendidas:
 - A caixa de seleção **Cache Chromatograms for Faster Peak Review** fosse marcada.
 - Os arquivos de dados usados para criar os resultados tivessem nomes de arquivo idênticos e fossem armazenados em pastas separadas.
 - O usuário criasse múltiplas **Results Tables** simultaneamente usando o assistente **Results Table**. Esta versão soluciona esse problema de forma que essas condições não resultem mais em dados incorretos na **Results Table**. (MQ-297)

Suporte

Documentação adicional

Consulte a documentação que acompanha o software.

Fale conosco

Suporte **SCIEX**

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

Treinamento do consumidor

- Na América do Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- Na Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fora da União Europeia e da América do Norte, visite sciex.com/education para informações de contato.

Centro de aprendizagem online

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/sciexuniversity)

Para obter as orientações mais recentes sobre segurança cibernética para SCIEX produtos, acesse sciex.com/productsecurity.

Suporte técnico

A SCIEX e seus representantes mantêm uma equipe de atendimento totalmente treinada e especialistas técnicos localizados em todo o mundo. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que possam surgir. Para mais informações, acesse o site da SCIEX em sciex.com.

Histórico de revisão

Revisão	Motivo da mudança	Data
A	Primeira publicação do documento.	setembro de 2013
B	Adicionado "Alterações da versão 3.0 para a versão 3.0.1". Adicionado o problema MQ-342.	agosto de 2014
C	Adicionado "Alterações da versão 3.0.1 para a versão 3.0.2". Atualizado Limitações e problemas conhecidos Removidas as referências ao Analyst Administrator Console.	janeiro de 2015
D	Alterado AB SCIEX para SCIEX quando necessário. Atualizada a página de copyright. Alterado o logo da empresa para Sciex Diagnostics. Adicionado Alterações da versão 3.0.2 para MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1 ". Adicionado Alterações do MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix para a versão 3.0.3 ". Atualizadas as seções Pré-requisitos para instalação usando o DVD, Requisitos adicionais do software, Instalar o software, Remover o software e Limitações e problemas conhecidos.	junho de 2017