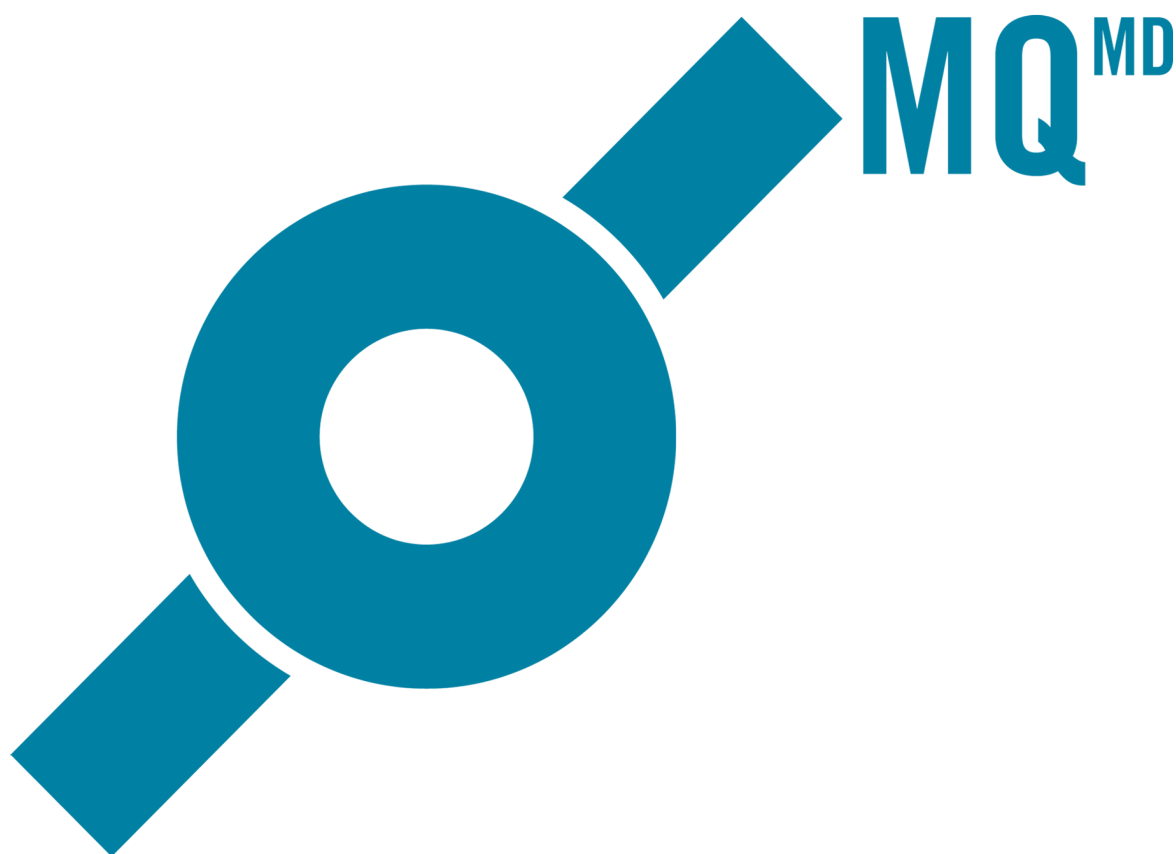

MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェア

リリースノート



本書はSCIEX機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEXが書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

本機器は研究専用です。診断手段としての使用は想定されていません。実験室用診断への使用を推奨します。保証は後述の通りです。

IVD

すべての国で販売されているわけではありません。このような使用はいかなる場合も、これらの製造業者による製品をSCIEXの供給機器として扱う場合に限り、その権利やライセンスの使用、またはその他の業者にこれらの製造業者名および製品名の商標利用を許可するものではありません。

SCIEXの保証は販売またはライセンス供与の時点で提供される明示的保証に限定されており、またSCIEXの唯一かつ独占的な表明、保証および義務とされています。SCIEXは、制定法若しくは別の形の法律、または取引の過程または商慣習から生じるかどうかに関わらず、特定の目的のための市場性または適合性の保証を含むがこれらに限定されず明示的・黙示的を問わず、いかなる種類の他の保証も行わない。そのすべては明示的に放棄されている。またAB Sciexは購買者による使用、またはそれから生じる逆境が原因の間接的または必然的な損害を含め、一切の責任または偶発債務を負わないものとします。

CE

実験室用診断への使用。

Rx only.

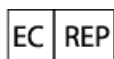
すべての国で販売されているわけではありません。詳細についてはSCIEX販売代理店にお問い合わせください。

AB SciexはSciexブランドの下で事業を行っています。

ここに示されているすべての商標は、AB Sciex Pte. Ltd. またはそれぞれの権利保有者の財産です。

AB SCIEX™ はライセンスの下で使用されています。

© 2017年 AB Sciex



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



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus.Estate.
シンガポール 739256

内容

1 リリースノート.....	4
MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1からバージョン3.0.3への変更.....	4
MultiQuant™ MDソフトウェアの機能.....	4
インストール方法.....	6
DVDを使用したインストールの前提条件.....	6
ソフトウェアの追加要件.....	6
ソフトウェアのインストール.....	6
ソフトウェアの削除.....	7
使用上の注意.....	8
既知の問題と制限事項.....	9
バージョン3.0.2からMultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1への変更.....	10
バージョン3.0.1からバージョン3.0.2への変更.....	11
バージョン3.0からバージョン3.0.1への変更.....	12
サポート.....	13
その他のドキュメント.....	13
お問い合わせ先.....	13
テクニカルサポート.....	13
改訂履歴.....	14

MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1からバージョン 3.0.3への変更

新しい機能

- ・ MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアは、Microsoft Windows 10（64ビット版）オペレーティングシステムに対応しています。
- ・ MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアは、Microsoft Office 2016に対応しています。
- ・ MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアでは、MRM1の行にMRM2/MRM1の実際の比率および予想される比率が表示されるようになりました。
- ・ MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアは、LIMSへの追加の列の転送に対応しています。
- ・ MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアは、ユーザーが他の分析試料に移動する際に、サンプルが閲覧されたことを記憶し、カーソルをそのサンプル上にとどめます。

修正された問題

Scheduled MRM Pro極性切り替えデータ処理に関する問題

MQ-2512は修正されました。これまで、ユーザーはScheduled MRM Pro極性切り替えデータを処理することができませんでした。

スペースが均一でないフルスキャンデータのイオンの合計が正しく動作しない

MQ-2513は修正されました。スペースが均一でないフルスキャンデータでは、イオンの合計が正しく動作しませんでした。TOFIDAまたはScheduled MRM HRのようなデータタイプについて合計イオン数を算出しているときに、ピーク領域の合計が予想する値よりも大きくなる場合があります。

MultiQuant™ MDソフトウェアのアップグレード時にマウスのカーソルが点滅する

MQ-2801は修正されました。MultiQuant™ MD 3.0.2バージョンまたはMultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1にアップグレードするときに、マウスカーソルが点滅する問題が発生しました。

MultiQuant™ MDソフトウェアの機能

MultiQuant™ MDソフトウェアは、SCIEX装置のデータ処理用に設計された定量パッケージです。MultiQuant™ MDソフトウェアは、Analyst® MDソフトウェアの定量モジュールでは利用できない新しい追加機能を多数搭載しています。

- ・ 複数のバッチおよびwiffファイルからサンプルを追加することができます。
- ・ より速く、より良く：高速化：
 - ・ 素早い操作：MultiQuant™ MDソフトウェアのユーザーインターフェースデザインを改良し、列を視覚的に識別して選択したり、複数のコンポーネントが含まれるサンプルに素早くサンプルを割り付けるなど、素早く操作できるようになりました。
 - ・ 積分の高速化：大規模なMRMデータセットでは、最新バージョンのAnalyst® MDソフトウェアの積分アルゴリズムであるMQ4を用いた積分が著しく速くなっており、ユーザーはデータを素早くレビュー・編集できます。
- ・ **SignalFinder™**積分アルゴリズムの導入
 - ・ **SignalFinder**積分アルゴリズムは、MultiQuant™ MD 3.0ソフトウェアに導入された新しい積分アルゴリズムです。このアルゴリズムでは、基準スペクトルを用いたピークモデリング機能を使用することにより、データの手動積分の必要性を最小限にするか、あるいはデータのパラメーターを微調整して、目覚ましい成果を上げることができます。
 - ・ **SignalFinder**™積分アルゴリズム内でダイナミックレンジの延長ができ、検出器の飽和が優勢なケース中にサンプルセットの動的レンジの上限を最大30回まで延長することができます。
- ・ **MultiQuant™ MD**進化した監査証跡ソフトウェア

MultiQuant™ MD 3.0ソフトウェアでは、定量の監査証跡操作を見直しました。このソフトウェアでは、素早い操作を可能にするツールが提供され、積分の差の比較を監査証跡エントリーと併せて同一画面で確認することができます。

 - ・ 検索：MultiQuant™ MDソフトウェアでは、ユーザーは監査証跡に迅速かつ効率的にフィルターをかけることができます。
 - ・ 「前後の」積分データの確認：監査証跡でサンプルをクリックすると、ユーザーは変更前後の積分クロマトグラムを即座に確認することができます。
- ・ 結果表のロックおよび迅速な電子署名
 - ・ ピーク積分後、ユーザーは結果表をロックすることができます。ロック後に結果表のロックを解除できるのは、適切な役割を割り当てられたユーザーのみです。ただし、QCレビューは監査証跡に結果表に関するコメントを記録することができます。これによって役割分担が強化され、適切な承認なくレビュー過程で変更が行われないようにしています。
 - ・ 積分の変更に対する電子署名は一本化されており、各変更に対して複数の電子署名を行うのではなく、クロマトグラムを変更する一連のイベントに対して1つの電子署名で承認を行います。

インストール方法

DVDを使用したインストールの前提条件

MultiQuant™ MDソフトウェアのインストールおよび実行には次のものがが必要です。ログオンしているユーザーは、必ずソフトウェアをインストールするコンピュータの管理者であること。Microsoft Windows 7およびWindows 10オペレーティングシステムでは、ユーザーアカウント制御設定が「Never notify」に設定されていること。

- ・ SP1を適用したWindows 7（32ビット版または64ビット版）またはWindows 10（64ビット版）のオペレーティングシステム。
- ・ Analyst® MD 1.6.1ソフトウェア（Windows 7 [32ビット版] オペレーティングシステム）
- ・ Analyst® MD 1.6.2ソフトウェア（Windows 7 [32ビット版および64ビット版] オペレーティングシステム）
- ・ Analyst® MD 1.6.3ソフトウェア（Windows 7 [32ビット版および64ビット版] およびWindows 10 [64ビット版] オペレーティングシステム）
- ・ .NET Framework 3.5（SP1以降）

注：Windows 7オペレーティングシステムでは、.NET 3.5 SP1はデフォルトでインストールされています。Windows 10オペレーティングシステムで、MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアのインストール前に.NET 3.5 SP1がインストールされていない場合は、.NET 3.5 SP1がインストールされていないため、インストール完了後にインストールが必要である旨をユーザーに通知されます。ユーザーはIT部門に連絡して.NET 3.5 SP1をインストールしてください。図 1-1を参照してください。

ソフトウェアの追加要件

- ・ SP1を適用したWindows 7およびWindows 10オペレーティングシステムの英語版にのみ対応しています。数字、通貨、日付、および時間のフォーマットは、必ず英語（米国）に設定してください。このフォーマットに別の値を設定すると、データがエラーとなる場合があります。
- ・ レポートの生成および修正には、Microsoft Office 2010、2013、または2016が必要です。

ソフトウェアのインストール

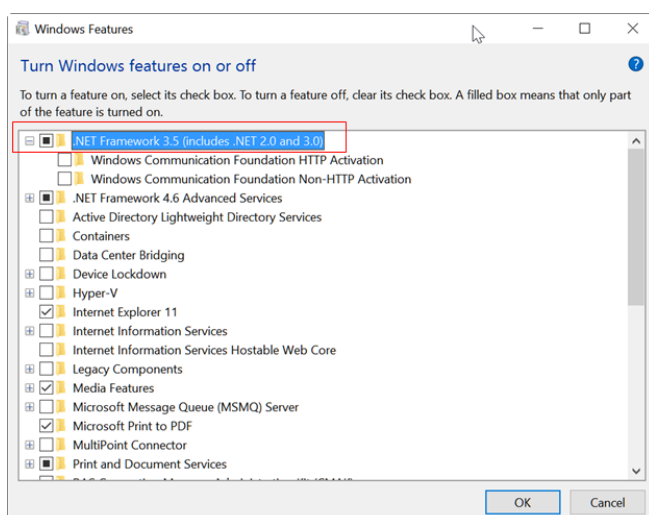
注：HotFix 1を適用したMultiQuant™ MD 3.0.2ソフトウェアからMultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェアにアップグレードする場合は、MultiQuant™ MDソフトウェアのインストール前に、まずhotfixを削除します。MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1リリースノートのHotFixの削除のセクションを参照してください。

1. **setup.exe**ファイルを実行します。
2. ライセンスをアクティベートします。
3. Windows 10オペレーティングシステムで、コンピュータに.NET 3.5がまだインストールされていない場合は、**Control Panel > Program and Features**で**Turn Windows features on or off**を選択します。

Windows Featuresダイアログが開きます。

4. **.NET Framework 3.5**オプションを選択して、.NET 3.5のインストールを有効にします。この操作にはIT部門の許可が必要な場合があります。

図 1-1 Windows Featuresダイアログ



5. インストール後、Windows Featuresダイアログに.NET 3.5が存在していることを確認します。インストールされていたら、**.NET Framework 3.5**オプションが選択されています。

ソフトウェアの削除

MultiQuantTM MDソフトウェアを削除してから、Analyst[®] MDソフトウェアを削除します。

1. **Control Panel**を開きます。
2. オペレーティングシステムに応じて、以下の手順に従ってください。

Windows 7またはWindows 10のオペレーティングシステムの場合
Programs または Programs and Features をクリックし、次に Uninstall a program をクリックします。
MultiQuant MD 3.0.x をクリックします。
Uninstall をクリックします。

削除中、MultiQuant™ MDソフトウェアの構成ファイルを削除するよう指示されます。このコンピュータにMultiQuant™ MDソフトウェアを後日再インストールする予定がある場合は、構成ファイルは削除しないでください。

使用上の注意

- MultiQuant™ MDソフトウェアは、Analyst® MDソフトウェアの*Scheduled* MRMアルゴリズム測定メソッドで定義した検出ウィンドウにおいてのみピーク積分を実施します。動的ウィンドウの拡張を用いた*Scheduled* MRM Proのデータについては、MultiQuant™ MDソフトウェアは検出ウィンドウの開始位置から終了位置まで、すなわちRT - 0.5 DetectionWindowから拡張ウィンドウの終了位置であるRT + 1.5 DetectionWindowまでピーク積分を行います。各トランジションの検出ウィンドウの開始位置および終了位置は、測定の開始位置および終了位置とは異なる可能性があります。
- MultiQuant™ MDソフトウェアは、10万行を超える結果表の処理時には動作しなくなることがあります。このような状況を避けるためには、処理を行うサンプル数を少なくして10万行未満の結果表を作成することを推奨します。
- ネットワーク取得を使用してデータファイルを取得中に当該ファイルの処理を行うと、競合するエラーが発生する可能性があります。このようなエラーを回避するためには、1つのwiffファイルにつき1回の注入にすることを推奨します。
- 10万行を超える結果表には、4 GB以上のRAMを搭載したコンピュータが必要な場合があります。
- コンピュータで日付をライセンスの契約期限後の日付に変更し、続いて現在の日付に戻そうとすると、ライセンスファイルが壊れます。
- 英語版のオペレーティングシステムにのみ対応しています。
- ワークステーションにMicrosoft Officeがインストールされていない場合は、レポート機能を使用することはできません。

- ・ レポートを正しく生成するためには、定量化メソッドの**Components**の表で、表の上部にすべての分析試料、下部にすべての内部標準を記載します。同じグループの分析試料は正しい順序で一緒に記載してください。定量化メソッドでは複数のグループを混在させることはできません。グループが混在すると、レポートの列が正しく配列されません。定量化メソッドでは、グループ化した分析試料とグループ化していない分析試料の混在に対応していません。すべての分析試料をグループに割り当てるか、すべての分析試料をグループに割り当てないでください。
- ・ ユーザーがMultiQuant™ MDソフトウェアのアクティブプロジェクトを変更し、その後Analyst® MDソフトウェアに戻ったときには、必ず新しいアクティブプロジェクトを**Project**リストから選択してください。Analyst MDソフトウェアのプロジェクトリストは、MultiQuant MDソフトウェアを使用してプロジェクトを変更しても、自動的に更新されません。

既知の問題と制限事項

- ・ Actual Conc.や希釈係数のような編集可能な列では、Ctrl + Dのフィルダウン機能は動作しません。この問題を回避するには、Actual Conc.列の位置を外れ値の理由と、また希釈係数列の位置を保持時間列と入れ替えます（MQ-2305）。
- ・ 内部標準（IS）を再積分し、変更を初めて適用する場合は、キャリブレーション方程式は再計算されません。同様の変更を行い次回適用する場合は、キャリブレーション方程式は再計算されます。この問題の対象となるのは、キャリブレーションカーブのUIに表示されるキャリブレーション方程式のみです。内部標準の再積分時には、結果は常に更新されます（MQ-2782）。
- ・ Windows 10オペレーティングシステムではインストール確認レポートが表示されず、ユーザーがレポートを印刷しようとするときpdfFactoryがインストールされていないのメッセージが表示されます。この問題を回避するには、コンピュータがネットワークに接続されていることを確認します。この問題は、インストール確認機能に影響を及ぼしません（MQ-3204）。
- ・ MultiQuant™ MDソフトウェアでは、**Create Report and Save Results Table**メニュー項目を使って、別のコンピュータからコピーしたロック済の結果表からレポートを生成しようとしたときに、操作を完了できませんのエラーメッセージが表示されます。これに対処するためには、ロックされた結果表のロックを現在のコンピュータで解除し、再度ロックします。その後レポートを作成します。

注：このような場合は、Analyst® MDソフトウェアを使用してレポートを作成することはできません。というのも、Analyst® MDソフトウェアのユーザーには、MultiQuant™ MDソフトウェアの結果表を解除するのに必要な権限がないためです

（MQ-1369）。

- ・ 測定ファイルのカスタム列とMultiQuant™ MDソフトウェアの**Results Table**の列に同じ名称を使用することは避けてください。名称が同じ場合は、カスタム列の情報が**Results Table**に読み込まれません。MultiQuant™ MDソフトウェアのリファレンスガイドに記載されたカラムのほか、**Barcode**および**Scanned Barcode**もMultiQuant™ MDソフトウェアでのみ使用されるため、測定メソッドで使用してはいけません。列の名称は大文字と小文字を区別しません（MQ-345）。
- ・ 定量化メソッドで外れ値の警告に濃度の上限のみを使用する場合は、ピークが検出されず結果表にN/Aと表示されるサンプルは、濃度に対する警告が正しく行われません（MQ-548）。
- ・ Analyst® MDソフトウェアで、アナリストの役割に割り当てられたローカルユーザーは、削除権限のないフォルダーに結果表をエクスポートおよび保存することができません。ユーザーが結果表をエクスポートして保存したい場合は、次の2つの選択肢があります：ハードドライブの別の場所に結果表をエクスポートするか、または同じ場所を選択し、同じファイル名を使って再度ファイルを保存します（MQ-600）。
- ・ 濃度の単位に空のキャリブレーションフィールドがある定量化メソッドをテキストファイルとしてエクスポートし、次にテキストとしてインポートする場合は、濃度の単位には単位およびキャリブレーションのデフォルト値ダイアログで規定した値が投入されます。保存の前に、ユーザーはメソッドに含まれるすべてのデータが正確であるかどうか確認することを推奨します（MQ-614）。

バージョン3.0.2からMultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1への変更

MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1は、以下の問題に対処しています。

複数イオンの合計に関する問題

MQ-2009は修正されました。これまで、一部のサンプルではピーク領域の合計が、個々のイオンのピーク領域の実際の値の合計よりも大きくなっていました。ピーク領域の合計は、現在は実際のピーク領域の合計と等しくなっています。

処理速度が改善

MQ-1895は修正されました。これまでは、MultiQuant™ MD 3.0.1ソフトウェアの手動積分の速度に比べて、MultiQuant™ MD 3.0.2ソフトウェアの手動積分は遅い速度で実施されていました。このHotFixをインストールすると、バージョン3.0.1と同様の速度になります。

手動積分に関する問題

MQ-549は修正されました。これまで、クロマトグラムの強度軸に「パーセントY軸」を選択して上書きモードで分析試料のクロマトグラムを表示すると、手動積分に誤りが生じていました。手動積分の誤りは修正されました。

バージョン3.0.1からバージョン3.0.2への変更

新しい機能

- ・ 標準を含むすべてのサンプルタイプについて、イオン比のクロマトグラムが表示されるようになりました。
- ・ すべてのサンプルタイプについて、予測されるイオン比および算出したイオン比が結果表に表示されるようになりました。サンプルの予測されるイオン比が規定の範囲外である場合、ソフトウェアがフラグを立てます。
- ・ クエリを含むレポートに対応できるようになりました。
- ・ Word、csv、およびHTMLフォーマットのレポートに対応できるようになりました。
- ・ 新規レポートタグが2つ追加されました：クエリ名およびレポートテンプレート名。
- ・ 定量化メソッドをテキストでインポートできるようになりました。
- ・ 定量化メソッドをテキストでエクスポートできるようになりました。
- ・ 新規レポートおよび関連クエリ：濃度閾値を伴うサンプルレポートが追加されました。

修正された問題

- ・ 結果表を作成後、ユーザーは結果表から標準を削除しないでください。これは、削除後に結果が再計算されないためです。ユーザーが標準を削除したい場合は、標準を削除後に結果表を保存して閉じ、その後結果表を再度開きます（MQ-382/493）。この問題は修正されました。
- ・ 処理メニューのキャリブレーションをエクスポートして結果表を保存する、または外部キャリブレーションのインポートの機能を使用してはいけません（MQ-387）。この問題は修正されました。
- ・ 外部キャリブレーションを適用後にユーザーがレポートを作成するときには、「Calculated Concentration」の列は変更しないでください。列の値は、レポート生成前の値と同じである必要があります（MQ-379）。この問題は修正されました。
- ・ 定量化メソッドのエクスポートはできますが、同じメソッドをインポートすることはできません。濃度の上限値が100を超える定量化メソッドをソフトウェアにインポートすることはできません（MQ-389）。この問題は修正されました。
- ・ バージョン3.0.1以前で作成した結果表では、結果を再度処理する場合でも、0.3未満の値に対するガウシアンスムーズが引き続き実行されます。0.3未満のガウシアンスムーズのすべての値で倍率が誤っています（MQ399）。MultiQuant™ MD 3.0.2ソフトウェアで作成する新しい結果表では、この問題は修正されました。処理中にガウシアンスムーズに0.3未満の値を適用した場合は、MultiQuant™ MDソフトウェアを使用して結果表を作成し、データを再処理することを推奨します。

- ・ イオン比の外れ値に対する警告は、QCサンプルには適用されません（MQ-282）。この問題は修正されました。

バージョン3.0からバージョン3.0.1への変更

注：バージョン3.0からバージョン3.0.1にアップグレードするには、追加のライセンスアクティベーションは不要です。

以下の問題が修正されました。

- ・ 管理者がユーザーグループをセキュリティ設定に追加し、その後当該グループをMultiQuant™ MDソフトウェアに追加すると、このグループのユーザーはMultiQuant™ MDソフトウェアを実行することができません。セキュリティ設定に個別ユーザーとして追加されたユーザーだけが、MultiQuant™ MDソフトウェアを実行することができません。この問題は修正されました（MQ-283）。
- ・ ユーザーはエクスポートするテキストファイルに相関係数（r値）を追加の列としてエクスポートできるようになりました（MQ-291）。
- ・ 単色の画像がレポートで追加サポートされるようになりました（MQ-292）。
- ・ これまでは、監査証跡で変更を破棄のオプションを選択すると、作成したレポートが削除されました。この問題は修正されました（MQ-289）。
- ・ クロマトグラムレポートの軸の表示が小さすぎて判読できませんでした。ユーザーは軸およびピーク表示のフォントサイズを、それぞれのピクチャタグのテンプレートの編集で指定することができます（MQ-294）。
- ・ **Results Table**の作成後にユーザーが**Edit Results Table Method**オプションを使用してメソッドを更新し、その後新規代表サンプルを再設定したときには、同一のMRMトランジションを使用している化合物がある場合、最初の化合物のQ1/Q3トランジションが以降の化合物にも使用されます。新規代表サンプルは別の.wiffファイルのサンプルであり、同一の化合物を異なる順序で測定しています。この問題は修正されました（MQ-342）。
- ・ これまでのリリースでは、以下のすべての条件を満たすとき、**Results Table**に誤ったデータが表示されていました。
 - ・ **Cache Chromatograms for Faster Peak Review**チェックボックスが選択されているとき。
 - ・ 結果を作成するのに使用したデータファイルに、別のフォルダに保存されている同じ名称のファイルがあるとき。
 - ・ **Results Table**ウィザードを使用して、ユーザーが同時に複数の**Results Table**を作成したとき。今回のリリースではこの問題が解決されたため、以上のような状況が生じても、今後は**Results Table**に誤ったデータが表示されることはありません（MQ-297）。

サポート

その他のドキュメント

ソフトウェアに付属のドキュメントを参照してください。

お問い合わせ先

SCIEXのサポート

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

お客様のトレーニング

- ・ 北米 : NA.CustomerTraining@sciex.com
- ・ ヨーロッパ : Europe.CustomerTraining@sciex.com
- ・ EUおよび北米以外の連絡先については、sciex.com/educationを参照してください。

オンライン学習センター

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

SCIEX製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、sciex.com/productsecurityを参照してください。

テクニカルサポート

SCIEXおよびその代理店は、十分に訓練を受けた保守/技術専門要員を世界中に配備しています。システムまたは起こり得る技術的問題に関するご質問にお答えします。詳しくは、SCIEXのウェブサイト (sciex.com) をご覧ください。

改訂履歴

改訂	変更の理由	日付
A	文書の初版	2013年9月
B	「バージョン3.0からバージョン3.0.1への変更」を追加。MQ-342を追加。	2014年8月
C	「バージョン3.0.1からバージョン3.0.2への変更」を追加。既知の問題と制限事項を追加。Analyst管理者コンソールへの参照を削除。	2015年1月
D	必要に応じてAB SCIEXをSCIEXに変更。著作権ページを更新。会社のロゴをSciex Diagnosticsに変更。「バージョン3.0.2からMultiQuant™ MD 3.0.2 HotFix 1への変更」を追加。「MultiQuant™ MD 3.0.2 HotFixからバージョン3.0.3への変更」を追加。DVDを使用したインストールの前提条件、ソフトウェアの追加要件、ソフトウェアのインストール、ソフトウェアの削除、および既知の問題と制限事項のセクションを更新。	2017年6月