

# Biacore™ Simul8 マニュアル ver1.0

April 7, 2021

---

## 概要

Biacore Simul8 はどなたでも無料でご利用いただける、パラメータを入力することで簡単に Biacore のセンサーグラムを簡単に描くことができる web 上のソフトウェアです。以下のようなときに利用します。

- 装置を使って解析した後に得られた  $k_a$ 、 $k_d$  などが正しいかどうかチェックしたいとき。
- 論文で数値しか書かれていないデータの当たりをつけたいとき。あるいは測定前に当たりをつけたいとき。

センサーグラムはアッセイパラメータやアッセイフォーマット（マルチサイクルとシングルサイクル）、選択されたモデルからの入力に基づいてシミュレートされます。

Biacore™ Simul8 :

<https://apps.cytivalifesciences.com/spr/>

## Basic kinetics

トップページより、Basic kinetics をクリックして始めてください。

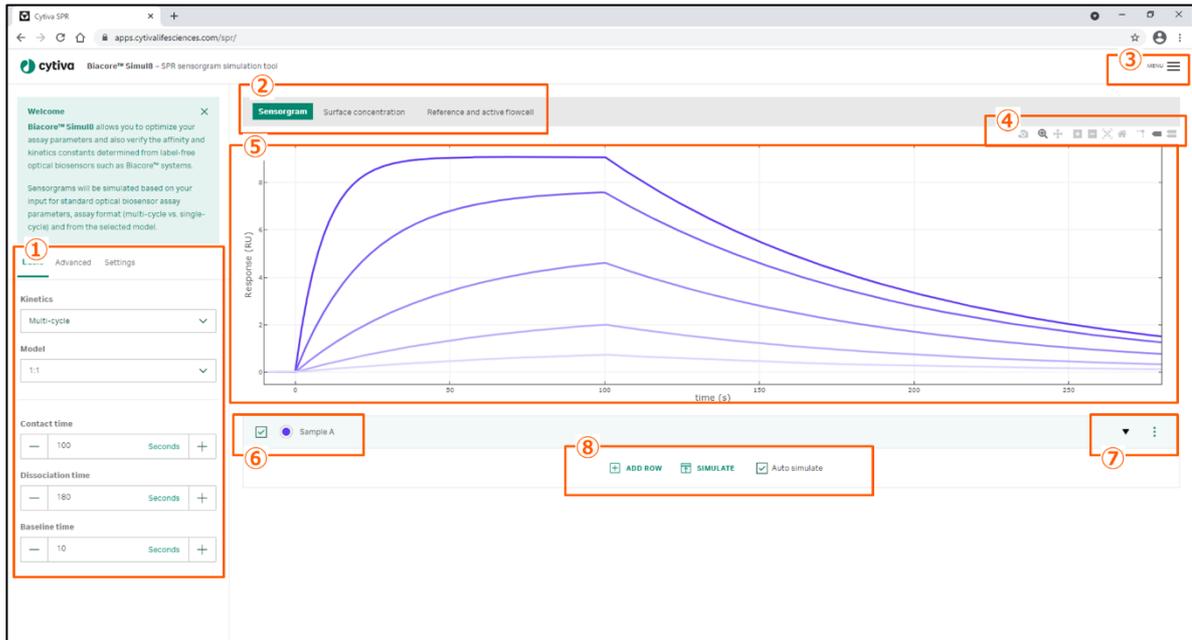


Fig.1

Basic kinetics を始めると Fig.1 のようなトップ画面が現れます。

- ① 基本的なアッセイパラメータの入力。
- ② ⑥ワーキングスペースの表示切替。①において Advanced を選択するとタブが増えます。
- ③ MENU ボタン。開くと Fig.2 のようなウィンドウが現れます。

**Return to start:** 全ての変更をキャンセルして一番初期の画面に戻ります。

**Open example:**  $k_a$  や  $k_d$  を固定した時の影響を検証するためのいくつかのデータがプリセットされています。

**Terminology:** Biacore 専門用語についての解説です。

**Download as SVG, Text:** それぞれの形式でセンサーグラムデータをダウンロードできます。

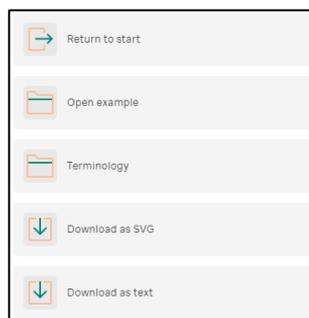


Fig.2

- ④
- a) ワーキングスペースのスナップショットを撮る機能です。(現在うまく稼働していないようです)
  - b) Zoom ボタンです。クリック後、ワーキングスペース上でクリック&ドラッグして拡大したい範囲を指定してください。
  - c) Pan (画面移動) ボタンです。クリック後、ワーキングスペース上でクリック&ドラッグしてワーキングスペース上で映したい画面の範囲を移動してください。なお x 軸、y 軸の適当な位置にマウスオーバーした際に ⇄ に変化しますが、この状態でも似たような移動が可能です。
  - d) Zoom in ボタンです。現在のワーキングスペースの中央に向けてズームインします。
  - e) Zoom out ボタンです。現在のワーキングスペースの中央からズームアウトします。
  - f) Auto scale ボタンです。ズームなどを繰り返したのち、一番初めの画面拡大倍率に戻すときに使用します。なお、この機能はワーキングスペース上で左ダブルクリックした場合でも同様です。
  - g) Reset axes ボタンです。機能面では f) と変わりません。
  - h) Toggle spike lines ボタンです。ワーキングスペース上に破線で x 軸、y 軸のガイドを出します。
  - i)、j) Show closest data on hover/Compare data on hover ボタンです。どちらか片方を指定できます。マウスオーバーした際に表示される詳細情報について、i)であれば最も近接する 1 つのデータのみとなり、j)であればデータセット全てについてを表示します。



Fig.3

- ⑤ ワーキングスペースです。
- ⑥ アナライトです。左のチェックボックスでワーキングスペースへの表示のオンオフを切り替えられます。
- ⑦ アナライトの情報を詳しく確認できます。Edit 方法は次の項目でご説明します。
- ⑧ **ADD ROW:** シミュレートするアナライトの数を増やせます。
- SIMULATE:** シミュレートしたアナライトのセンサーグラムをワーキングスペースに反映させます。Auto simulate のチェックが入っているときは動作しません。
- Auto simulate:** チェックが入っていると常に表示設定のアナライトのセンサーグラムがワーキングスペースに反映されます。

# アッセイパラメータの入力

Basic

The screenshot shows a software interface for setting assay parameters. At the top, there are three tabs: 'Basic', 'Advanced', and 'Settings'. The 'Basic' tab is selected and highlighted with a red box and a circled '1'. Below the tabs, there are three main sections, each also highlighted with a red box and a circled number:

- Section 1 (Kinetics):** A dropdown menu labeled 'Kinetics' is set to 'Multi-cycle'. Below it is a dropdown menu labeled 'Model' set to '1:1'.
- Section 2 (Contact time):** A numerical input field for 'Contact time' is set to 100, with 'Seconds' and '+'/'-' buttons.
- Section 3 (Dissociation time):** A numerical input field for 'Dissociation time' is set to 180, with 'Seconds' and '+'/'-' buttons.
- Section 4 (Baseline time):** A numerical input field for 'Baseline time' is set to 10, with 'Seconds' and '+'/'-' buttons.

Fig.4

- ① Basic を選択します。
- ② **Kinetics:** Multi-cycle あるいは Single-cycle を選択可能  
**Model:** 1:1 あるいは Heterogeneous Ligand を選択可能
- ③ **Contact time:** アナライトの添加時間  
**Dissociation time:** アナライトの解離時間  
**Baseline time:** アナライトが添加される前の時間

## Settings

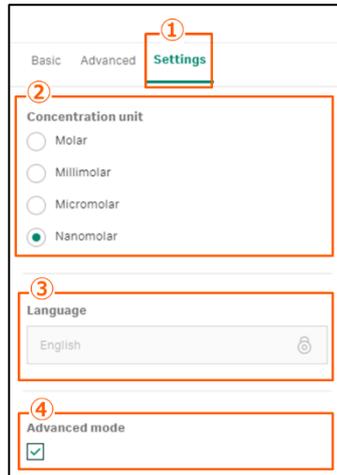


Fig.5

- ① Settings を選択します。
- ② アナライトの濃度の単位です。
- ③ 言語設定ですが、現在は English のみの対応です。
- ④ チェックで Advanced mode の設定が可能になります（後述）。

## Advanced

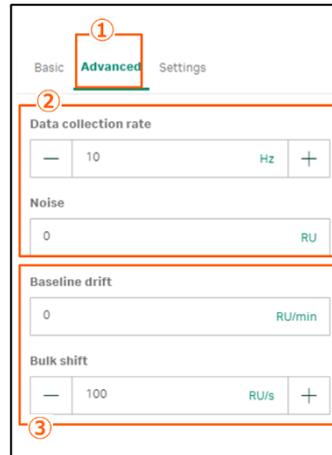


Fig.6

- ① Advanced を選択します。
- ② **Data collection rate:** 1 秒間に取得するデータポイントです。1-40 Hz で設定可能です。通常の Kinetics 解析では 10 Hz です。  
**Noise:** センサーグラムのノイズです。～1 RU まで設定可能です。
- ③ **Baseline drift:** センサーグラム全体のドリフトです。-1 ～ 1 RU まで設定可能です。
- ④ **Bulk shift:** アナライト添加直前と直後のバルクの設定です。≥ 0 RU で設定可能です。この変化はタブ *Reference and active flowcell* で確認可能です。

## 相互作用パラメータの設定

アナライトのタブから相互作用パラメータの設定が可能です。こちらは 1:1 binding のものです。

The screenshot shows a dialog box titled "Edit" with the following fields and values:

- ① Description: Sample A
- ②  $k_a$ : 1e+7 M/s
- ③  $k_d$ : 1e-2 1/M/s
- ④ Highest concentration: 10 nM
- ⑤ Concentrations per sample series: 5
- ⑥ Dilution factor: 3
- ⑦ Flowrate: 30 µl/min
- ⑧  $t_c$ : 1e+10
- ⑨  $R_{max}$ : 10 RU (Input  $R_{max}$  is selected)

Buttons: CANCEL, APPLY (⑩)

Fig.7

- ① サンプル名を入力してください。
- ②  $k_a$  を入力してください。
- ③  $k_d$  を入力してください。
- ④⑤⑥ Highest concentration: アナライトの最高濃度を指定してください。  
Concentrations per sample series: 何点分の濃度のデータを記述するか決めてください。  
Dilution factor: 何倍希釈公比とするか決めてください。
- ⑦ 流速を入力してください。
- ⑧  $t_c$  を入力してください。特別な条件でない限り、1e+10 のままで結構です。
- ⑨  $R_{max}$  を入力するか、計算から求めるか選択し、入力してください。
- ⑩ 設定が終わったら、Apply をクリックしてください。