球坐标系下钙火花的数值仿真

# 确定模型

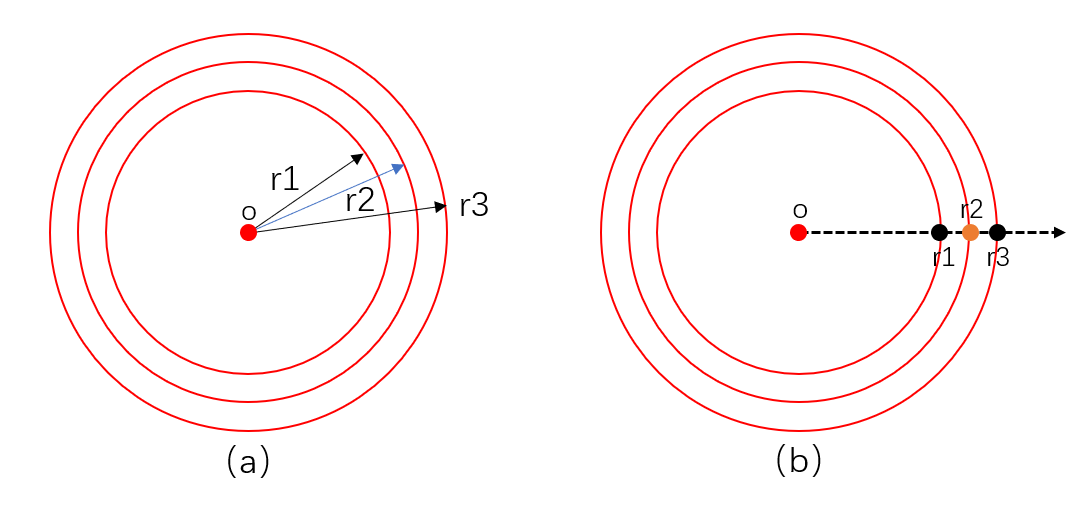


图 1

点o为球心，为此矢量场的源点。此矢量场具有球对称性，则对于每一球面，其上任一点的值都相等，则图1（a）、（b）同义。

# 确定扩散方程组

其中，

各参数含义及其标准值请见表1、表2。

表1-模型参数

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 参数 | 定义 | 标准值 |
|  | 胞浆内钙离子浓度 | 0.001mM |
|  | 荧光染料与钙离子结合产物的浓度 | 初始值由式子求出 |
|  | 缓冲物与钙离子结合产物的浓度 | 初始值由式子求出 |
|  | 钙离子扩散离开的量 | - |
|  | 钙离子被荧光染料结合的量 | - |
|  | 钙离子被所有钙离子缓冲物结合的量 | - |
|  | 钙离子被钙离子缓冲物结合的量 | - |
|  | ryr通道向肌浆网外释放钙离子的流量 | - |
|  | 自由钙离子的扩散系数 |  |
|  | 染料的扩散系数 | 见表2 |
|  | 钙离子与染料结合的结合速率常数 | 见表2 |
|  | 钙离子与染料离解的离解速率常数 | 见表2 |
|  | 染料的总浓度 | 见表2 |
|  | 钙离子与钙离子缓冲物结合的结合速率常数 | 见表2 |
|  | 钙离子与钙离子缓冲物离解的离解速率常数 | 见表2 |
|  | 钙离子缓冲物的总浓度 | 见表2 |
|  | ryr通道处钙离子释放的扩散系数 |  |
|  | jSR中的钙离子浓度 | 1mM |

表2

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Species | (mM-1s-1) | (s-1) | Concentration  (mM) | Diffusion conffcient  () |
| Fluo-3 | 80000 | 90 | 0.05 | 0.2 |
| Calmodulin | 100000 | 31 | 0.036 | 0.45 |
| Troponin C | 125000 | 250 | 0.07 | 0 |
| SR membrane | 115000 | 100 | 0.047 | 0 |
| SL membrane | 115000 | 1000 | 1.124 | 0 |

求各缓冲物对应的初始值的式子：

# 求数值解

因为偏微分方程的解析解求解很困难，所以通过一系列的**近似处理**求解此偏微分方程组的**数值解**。从时刻开始，按照固定的时间间隔（比如1微秒）计算每个时间点处各个点对应的函数值。一般情况下，时刻的各点函数值是已知的，即初始条件已知。

为方便求解，令，，；，，。

则原方程组化为

设求解的点为图1中的点。

## 处理拉普拉斯算子

### 通过积分构造等式

对于式(1)中的、式(2)中的，因为直接求解二阶导数进行近似误差很大，所以首先利用散度定理对拉普拉斯算子进行处理。因处理方式相同，下方展示式(1)处理过程。

式(1)通过移项，将带有拉普拉斯算子的项留在同侧，得到下式

然后对两侧进行积分，得

积分区域V为点所在球面与点所在球面嵌套形成的空间。

式(5)左侧，由体积分几何意义得

式(5)右侧，由散度定理得

其中，为单个微分面元上的通量，为此点梯度，为此点法向量。

### 确定梯度、法向量

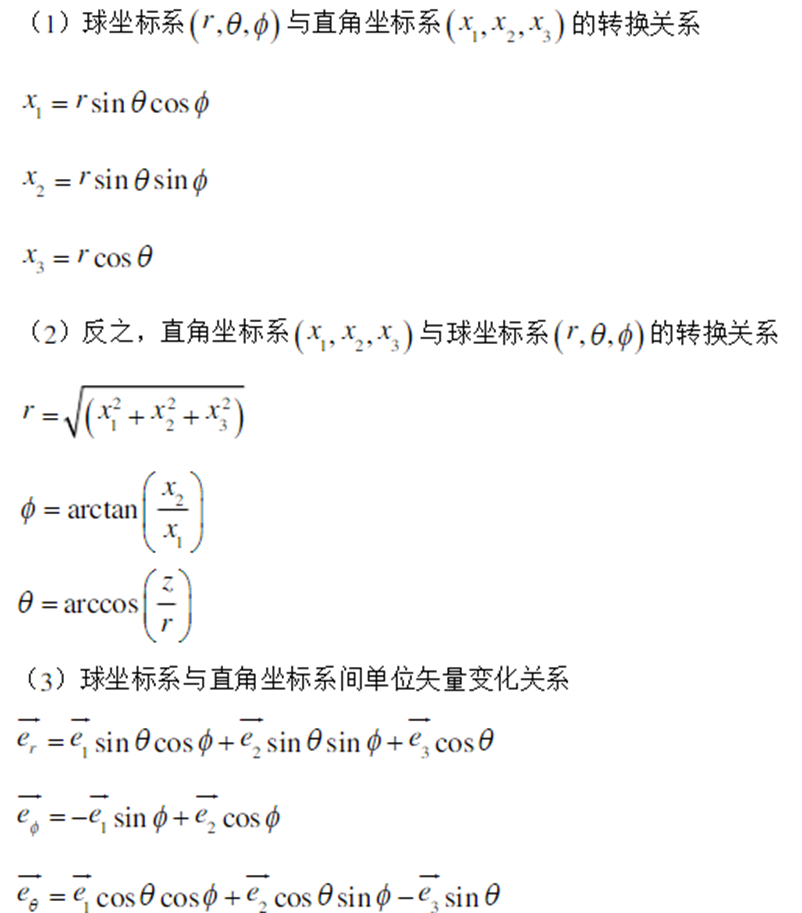
因为此模型球对称，所以有。则

同理，

则

在球坐标下，球面法向量即为则有

### 计算



结合球坐标系与直角坐标系间的矢量变化关系，可得

结合直角坐标系与球坐标系的转换关系，可得

结合球坐标系与直角坐标系得转换关系，可得

### 计算通量

综上可得单个微分面元上的通量

又因球对称性，对于任一球面，此球面上每个点的通量皆为。

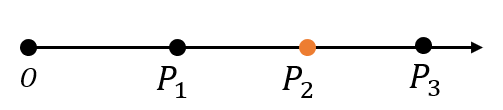
则有

将得到的式(6)、式(17)代入式(5)可得

则有

同理可得

## 步骤二：处理一阶偏导数、



若解点的一阶偏导数，则有

若解点的一阶偏导数，则有

对于式中的、、、，有两种选择。一是选择时刻的函数值；二是选择时刻的函数值。

## 步骤三：处理时间

假设时刻的已计算出来，为计算下一时刻的，需要对方程进行处理。

令，其中，。则有

即

据步骤二计算时有两种取值情况，在不同取值情况，计算方式有所不同。对于的求解同样也有两种情况。

为解决扩散问题，将式(27)中的部分、做以下替换：

其中

### 情况一

若计算时选择时刻的函数值，、中的使用时刻的值，中的使用时刻的值，、使用的都是时刻的值。

点所处位置不同计算情况也不同，现根据点所处位置进行分类讨论。

1. **点在非中心非边界处**

此种情况为最一般的情况，。

得

其中

1. **点在中心处**

不存在，令，则有

又因此时，得

得

其中

1. **点在边界处**

不存在，令，则有

得

其中

假设有k个点，位于中心的点编号为1，则边界的点编号为k，根据以上三种情况则有以下形式的矩阵方程：

解出上方矩阵方程即可得到各点时刻的值。

对于求解，同理可得

1. **点在非中心非边界处**

此种情况为最一般的情况，。

得

其中

1. **点在中心处**

不存在，令，则有

又因此时，得

得

其中

1. **点在边界处**

不存在，令，则有

得

其中

假设有k个点，位于中心的点编号为1，则边界的点编号为k，根据以上三种情况则有以下形式的矩阵方程：

解出上方矩阵方程即可得到各点时刻的值。

### 情况二

上式中用n+1时刻的未知量移到左边，、用每一次迭代求得的新值。

设，则原方程(1)可化简为：

【注】标绿的项表示上一次迭代求得的新值，标红的项为n+1时刻的值。

将右边的移到等式左边，化简得：

当在临界值上的处理：

1. 当时，对于

设，那么：

【注】上式中用上一次迭代求的新值，用n+1时刻的值。

由于在此位置，所以方程可写为：

1. 当时，对于：

设，那么：

【注】上式中用上一次迭代求得的新值，用n+1时刻的值。

由于在此位置，，将写作移到等式左边并化简可得：

**对方程整理如下：**

1. 当时：
2. 当时：
3. 当且时：

【注】

1. 标注为绿色的项第1次迭代用n时刻的值，之后每次迭代用新求得的值。

**对方程整理如下：**

对于下面染料方程也是做同样的处理：

1. 当时：
2. 当时：
3. 当且时：

【注】

1. 标注为绿色的项第1次迭代用n时刻的值，之后每次迭代用新求得的值。

**对缓冲物更新的方程整理如下：**