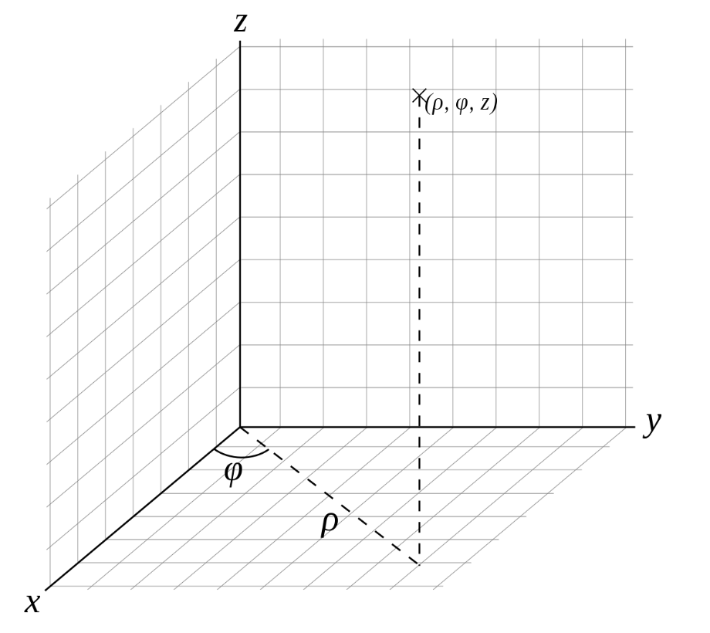
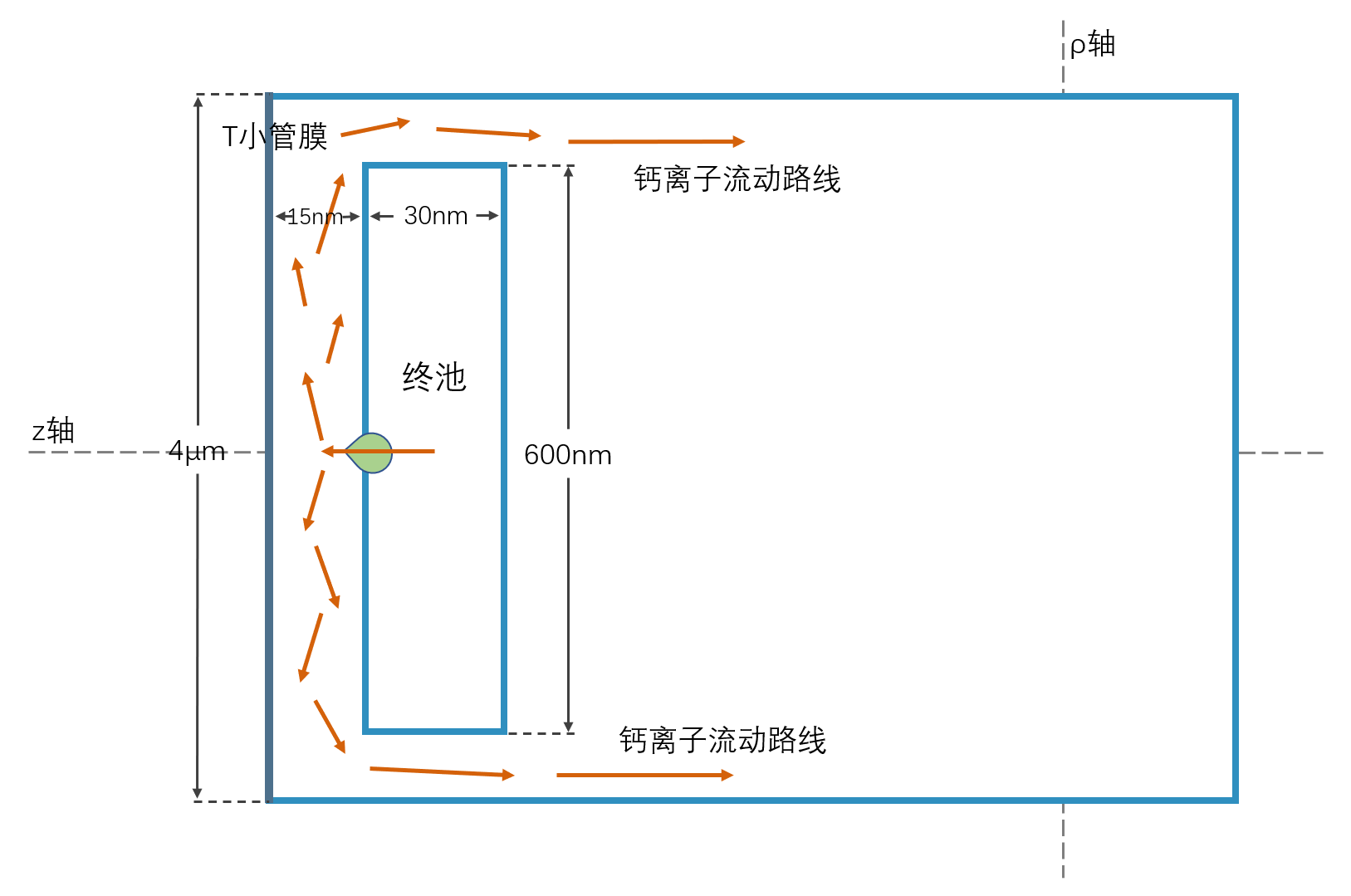
## 纳米钙火花几何模型（柱坐标系下）



如左图所示，柱坐标系(ρ,φ,z)与直角坐标系(x,y,z)的转换关系为：x=ρcosφ，y=ρsinφ，z=z。

则柱坐标系对应的拉普拉斯算子表示为：

**图12-柱坐标系**

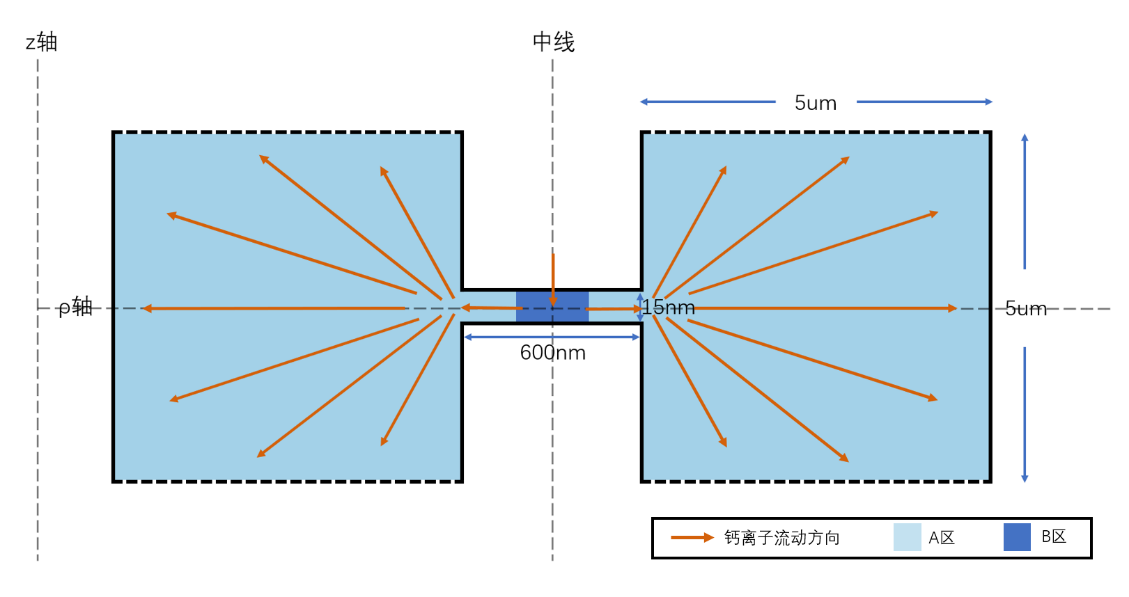


**图13-纳米钙火花几何模型**：此模型可用四边形网格模拟

如图13所示，此几何模型关于终池直径对称，因此函数值关于φ无变化，即对φ求导为0。综上，在此几何模型下，拉普拉斯算子转转为下式：

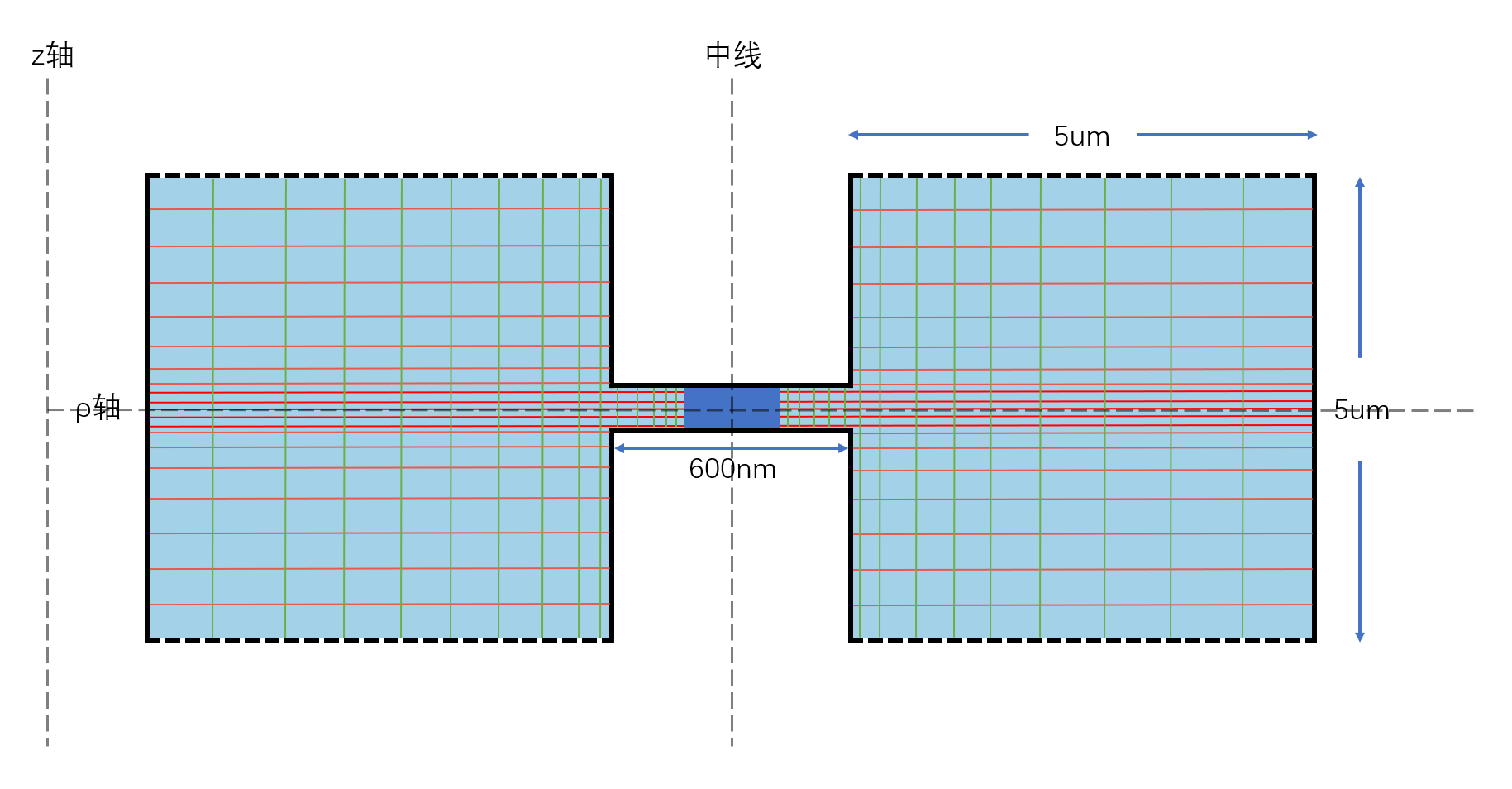
## 纳米钙火花仿真

### 网格划分



**图14-纳米钙火花的几何模型剖面**

如图14所示，发生纳米钙火花的亚空间可由一个宽15nm、长600nm的矩形表示，矩形两侧宽5μm的方形表示钙离子经亚空间流出后进入的更大的空间，方形上下边的虚线用以表明钙离子到此处仍会继续扩散。此剖面以中线为轴旋转360度产生的几何体即为钙离子流动的三维空间。



**图15-纳米钙火花网格划分示意图**

对此几何形状进行网格划分时，可以使用结构化网格对该区域进行网格划分。在亚空间的B区域网格密度较高，B区域长30nm，宽15nm，关于中线对称。在B区内，沿z轴方向临近入流点位置7nm的区间内网格间隔取0.5nm，剩余8nm的区间内网格线间隔取1nm，沿ρ轴方向中线两侧各15nm的区间内网格线间隔取0.5nm。对于A区内的网格，随着接近边界处网

格密度均逐渐降低。（见图15）

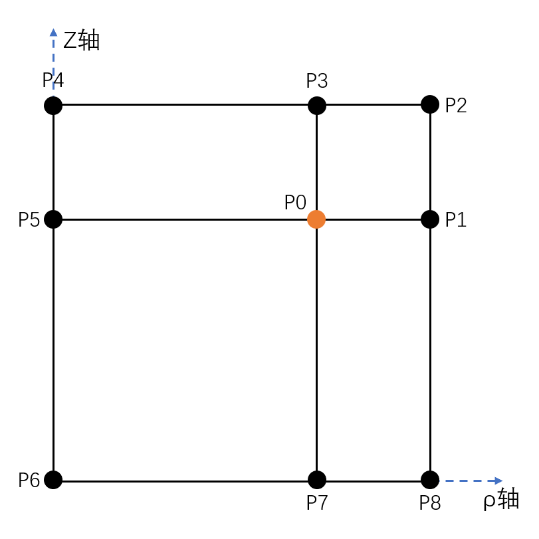
### 纳米钙火花数值模拟

1. 扩散方程

其中，

各参数含义及其标准值请见表1、表2、表3。

1. 处理拉普拉斯算子中的、、



令，。设点为所求点，有一下三种求导方式：

方式一、

，

，

点为沿ρ轴正方向上紧邻点且与点z坐标值相同的点；点为沿在z轴正方向上紧邻点且与点ρ坐标值相同的点。

若没有符合上述条件的点、点，则取、两点的加权平均浓度值充当点的浓度值；取、两点的平均浓度值充当点的浓度值。若所求点在沿ρ轴正方向上或沿z轴正方向上没有邻点，则令其对ρ的偏导数或对z的偏导数为0。

方式二、

，

，

点为沿ρ轴负方向上紧邻点且与点z坐标值相同的点；点为沿在z轴负方向上紧邻点且与点ρ坐标值相同的点。

若没有符合上述条件的点、点，则取、两点的加权平均浓度值充当点的浓度值；取、两点的平均浓度值充当点的浓度值。若所求点在沿ρ轴负方向上或沿z轴负方向上没有邻点，则令其对ρ的偏导数或对z的偏导数为0。

方式三、

对通过方式一和方式二得到的导数求平均值：

，

，

1. 处理、、，进而求解某点在n+1时刻的浓度值

为方便计算，令，，；，，。则，，。假设时刻的浓度值已知，则可通过下方的处理得到时刻的浓度值。

令，，。则有，

进而，得，

上方三个式子右侧的浓度值取t时刻的浓度值。

表1-模型参数（“-”表明此值是随时空位置变化的）

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 参数 | 定义 | 标准值 |
|  | 胞浆内钙离子浓度 | 见表2 |
|  | 荧光染料与钙离子结合产物的浓度 | 见式1 |
|  | 缓冲物与钙离子结合产物的浓度 | 见式1 |
|  | 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 | 见表2 |
|  | 钙离子与GCaMP6f结合的结合速率常数 | 见表2 |
|  | 钙离子与GCaMP6f离解的离解速率常数 | 见表2 |
|  | GCaMP6f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 | 见表2 |

表2-

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Species | Location | (mM-1s-1) | (s-1) | Concentration  (mM) | Diffusion conffcient  () |
| Ca2+ | cyto,cleft | - | - | 0.0001 | 3.5 |
| Ca2+ | jSR | - | - | 1 | 3.5 |
| Ca2+ | nSR | - | - | 1 | 0.6 |
| ATP | cyto,cleft | 13700 | 30000 | 5 | 1.5 |
| Fluo-3 | jSR | 80000 | 90 | 0.05 | 0.2 |
| Fluo-4 | cyto,cleft | 48800 | 43.9 | 0.05 | 0.33 |
| Fluo-5N | jSR | 48800 | 19520 | 0.1 | 0.33 |
| Fluo-5N | nSR | 48800 | 19520 | 0.1 | 0.01 |
| GCaMP6f | cyto | 27000 | 17 | 0.01 | 0 |
| Calsequestrin | jSR | 39000 | 78000 | 300 | 0 |
| Calsequestrin | nSR | 39000 | 78000 | 60 | 0 |
| Calmodulin | cyto,cleft | 100000 | 31 | 0.036 | 0.45 |
| Troponin C | cyto | 125000 | 250 | 0.07 | 0 |
| SR membrane |  | 115000 | 100 | 0.047 | 0 |
| SL membrane |  | 115000 | 1000 | 1.124 | 0 |

各缓冲物对应的