# 纳米钙火花几何模型（柱坐标系下）

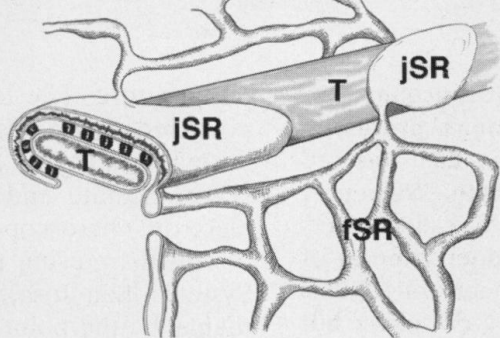


图1-T小管、jSR空间关系

如图1所示，肌浆网终池，即jSR，呈薄饼状，并包绕在T小管外，两者之间形成了一个纳米级别的亚空间，且可看到状如脚的雷诺丁受体，即RyR。终池内钙离子经RyR通道释放后，首先会经过亚空间，然后进入空间尺度更大的开放空间，发生在亚空间的钙离子释放事件即为纳米钙火花。

沿T小管纵向进行剖面，可得到如图2的示意图。终池为一个直径600nm，厚度30nm的薄饼，覆盖于长度为4μm的T小管之上，终池靠近T小管膜的一侧有一个直径为10nm的RyR通道。T小管膜与终池膜之间形成了一个直径为600nm，高度为15nm的亚空间。

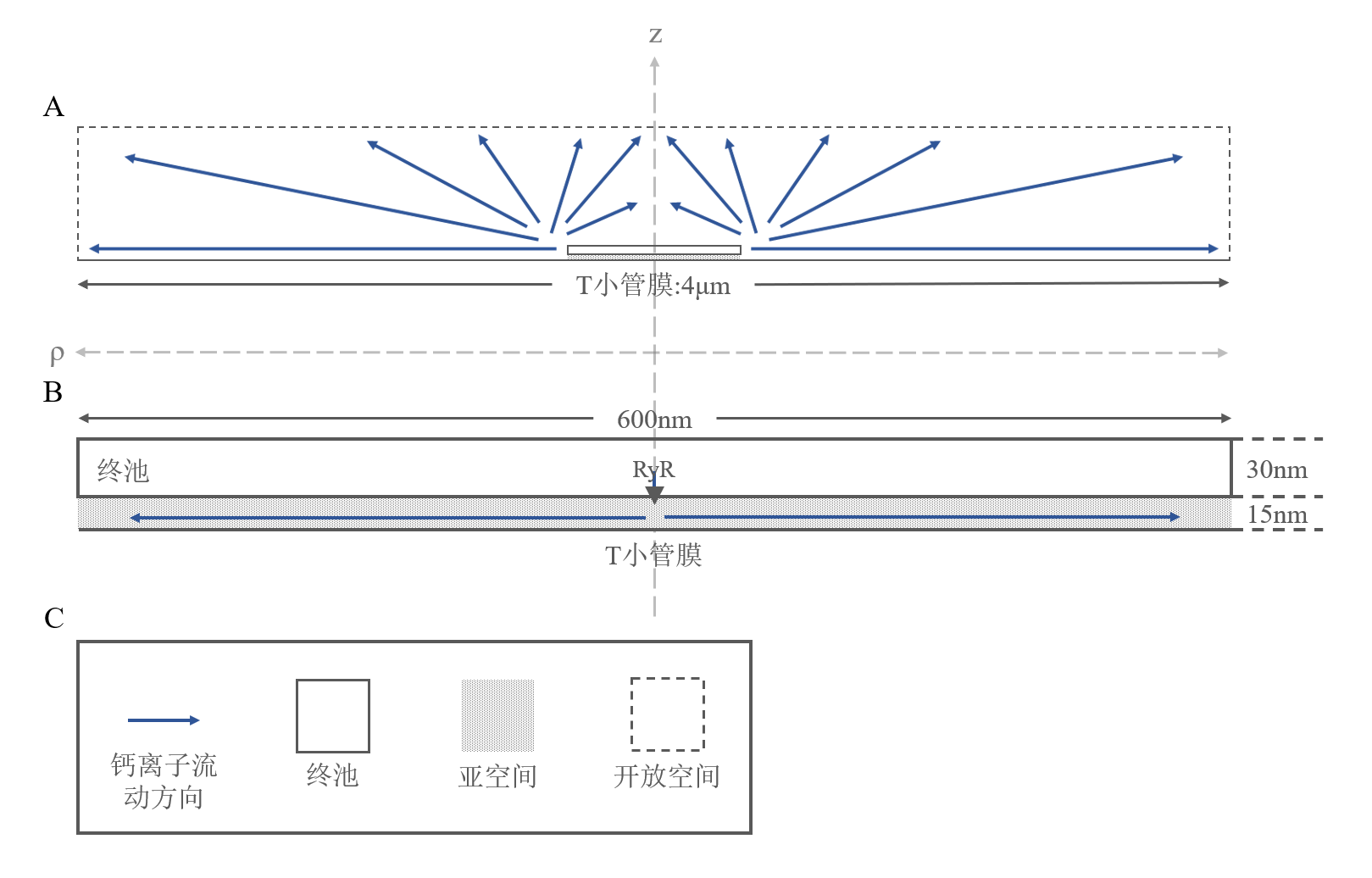


图2-T小管纵向剖面示意图（真实比例）

## 网格划分

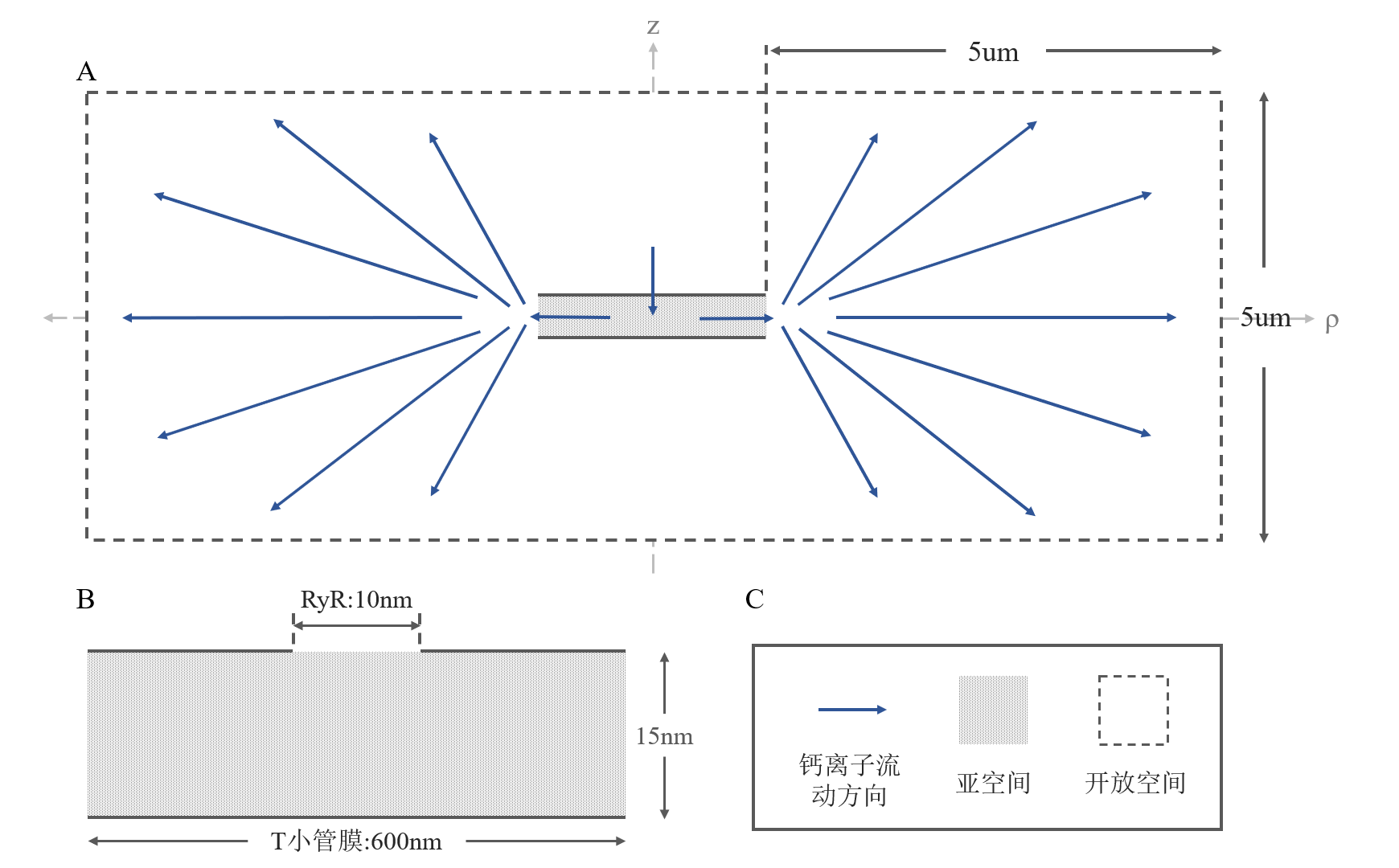


图 3-纳米钙火花几何模型剖面

如图3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，矩形周围的空间表示钙离子经亚空间流出后进入的更大的空间。此剖面以z轴为轴旋转360度产生的几何体即为钙离子流动的三维空间。

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。

亚空间的网格密度较高。在亚空间内，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，nm区间间隔为1nm，nm区间间隔为2nm，nm区间间隔为4nm。

对于开放空间的网格，随着接近边界处网格密度均逐渐降低。

# 数值模拟

其中，

各参数含义及其标准值请见附录中表1、表2。

# 求数值解

为方便计算，令，，，；，，。

## 处理拉普拉斯算子

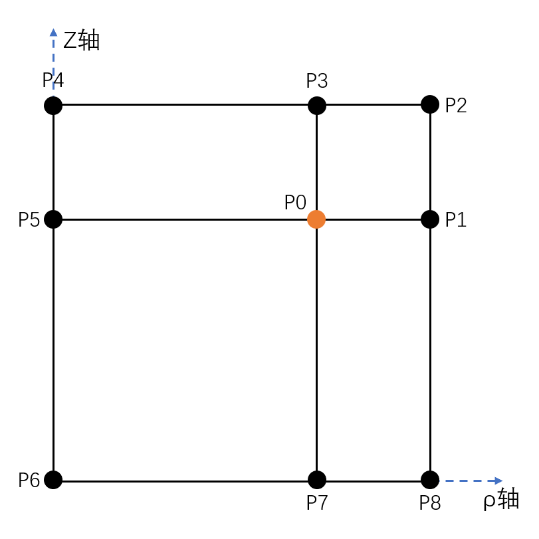
具体过程见PPT：柱坐标扩散方程的散度定理推导。

## 离散化

具体过程见PPT：柱坐标扩散方程的散度定理推导。

## 求解时刻的值

### 关于邻居的说明



为沿ρ轴正方向上紧邻且与 z坐标值相同的点，称为在ρ轴正方向上的邻居；点为沿在z轴正方向上紧邻点且与 ρ坐标值相同的点，称为在z轴正方向上的邻居。同理、分别为在ρ轴负方向上的邻居、在z轴负方向上的邻居。

由于网格划分精度不同，在纳米区域与开放区域交界处会有不对齐的情况，此时不可视为无邻居，应按照以下方式处理：

若没有符合上述条件的，则创建虚拟点作为在ρ轴正方向上的邻居。此虚拟点的ρ坐标值取或的ρ坐标值，z坐标值取的z坐标值，浓度值取、两点的加权平均浓度值。对于其余方向处理方式类似。

加权浓度值的计算方式：

### 边界条件

当位于边界时，对应方向上则无邻居，此时设置边界条件为

### 具体计算

方法一：计算时各邻居点值取时刻的值，解线性方程组

不采取。

方法二：计算时各邻居点值取时刻的值，迭代计算

见PPT：纳米钙火花与钙火花。

## 求解时刻的值

## 求解时刻、的值

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皆取t时刻的浓度值。

# 附录

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GCaMP6f与钙离子结合产物的浓度 | 见式a1 |
|  | 荧光染料Fluo-3与钙离子结合产物的浓度 | 见式a1 |
|  | 缓冲物与钙离子结合产物的浓度 | 见式a1 |
|  | 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Fluo-3结合的结合速率常数 | 见表2 |
|  | 钙离子与Fluo-3结合的离解速率常数 | 见表2 |
|  | Fluo-3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