Ionenkanäle in *madSim* mit dem Golowasch-Buchholtz Modell

- Zur Berechnung von Diffentialgleichungen ist als Standard die exponentielle Methode nach Euler eingestellt. Diese Methode setzt vorraus, dass die zu berechnenden Differentialgleichungen von der Form

  $$\frac{da}{dt} = B - A \cdot a \tag{1}$$

  sind.

- Das Golowasch-Buchholtz Modell berechnet einen Ionenstrom wie folgt:

  $$i_j = \bar{g}_j \cdot a^p \cdot b^q \cdot (V - E_j) \tag{2}$$

  wobei:

  $$\begin{aligned}
  i_j &= \text{Ionenstrom durch die Membran für das Ion } j \\
  \bar{g}_j &= \text{maximale Leitfähigkeit für } j \\
  a &= \text{Öffnungswahrscheinlichkeit des Aktivierungstors} \\
  b &= \text{Öffnungswahrscheinlichkeit des Inaktivierungstors} \\
  p, q &= \text{Anzahl der Untereinheiten des Kanals} \\
  V &= \text{aktuelles Membranpotential} \\
  E_j &= \text{Gleichgewichtspotential für } j
  \end{aligned}$$

- Die Öffnungswahrscheinlichkeit a wird dann mit einer Differentialgleichung beschrieben:

  $$\frac{da}{dt} = [a_\infty(V) - a] \cdot k_a(V) \tag{3}$$

  wobei:

  $$\begin{aligned}
  a_\infty &= \text{steady state Kurve für } a \\
  k_a(V) = \frac{1}{\tau_a} &= \text{Abfalls Rate}
  \end{aligned}$$

  Umformen von Gleichung (3) ergibt:

  $$\frac{da}{dt} = \frac{a_\infty(V)}{\tau_a} - \frac{1}{\tau_a} \cdot a \tag{4}$$

d.h für die numerische Lösung mit der exponentiallen Euler Methode muss

$$A = \frac{1}{\tau_a} \text{ und } B = \frac{a_\infty}{\tau_a} \tag{5}$$

gesetzt werden, damit:

$$\frac{da}{dt} = B - A \cdot a \tag{6}$$

ist (vgl. Gleichung (1)).

- Wenn man nun die Berechnung in *madSim* so einstellt, dass

$$A = \frac{1}{\beta} \text{ und } B = \frac{\alpha}{\beta} \tag{7}$$

ist, dann folgt:

$$\alpha = a_\infty \text{ und } \beta = \tau_a \tag{8}$$

- Nun muss man noch die Formparameter so wählen, dass sie zu den gegebenen Funktionen von a_∞ und τ_a passen und die Werte für die Rate Constant k das Halbmaximumpotential $V0$ und die Schrittweite s eingeben.

- FormParameter in *madSim*:
exponentielle Funktionen:

Nummer 1: $k \cdot e^{\frac{E-V0}{s}}$ Nummer 4: $\frac{W+e^{\frac{E-V0}{s}}}{k}$

Nummer 2: $k \cdot e^{\frac{E-V0}{-s}}$ Nummer 5: $\frac{W+e^{\frac{E-V0}{-s}}}{k}$

Nummer 3: $k \cdot (W + e^{\frac{E-V0}{-s}})$ Nummer 6: $k \cdot (W + e^{\frac{E-V0}{s}})$

linoide Funktionen:

Nummer 11: $\frac{k \cdot (E-V0)}{W-e^{\frac{E-V0}{s}}}$ Nummer 14: $\frac{k \cdot (V0-E)}{W-e^{\frac{E-V0}{-s}}}$

Nummer 12: $\frac{k \cdot (E-V0)}{W-e^{\frac{E-V0}{-s}}}$ Nummer 15: $\frac{k+\frac{k}{V0} \cdot E}{W+e^{\frac{E+V0}{s}}}$

Nummer 13: $\frac{k \cdot (V0-E)}{W-e^{\frac{E-V0}{s}}}$

sigmoide Funktionen:

Nummer 21: $\frac{k}{W+e^{\frac{E-V0}{s}}}$ Nummer 25: $\frac{1}{W+e^{\frac{E-V0}{-s}}}$

Nummer 22: $\frac{k}{W-e^{\frac{E-V0}{-s}}}$ Nummer 26: $\frac{k}{W-e^{\frac{E-V0}{s}}}$

Nummer 23: $\frac{k}{W+e^{\frac{E-V0}{-s}}}$ Nummer 27: $\frac{k}{W}$

Nummer 24: $\frac{1}{W+e^{\frac{E-V0}{s}}}$ Nummer 28: $\frac{k}{W+e^{\frac{E+V0}{s}}}$

Nummer 101: $F-\frac{k}{W+e^{\frac{E-V0}{-s}}}$

konstante Funktionen:

Nummer 31: $\frac{1}{W}$

Dabei ist W immer 1, ausser in den Formparametern 1 und 2, da gilt $W = 0$ und in Formparameter 31 gilt $W = \frac{1}{k}$, in Formparameter 27 ist $W = c3 + \left[Ca^{2+}\right]$