

目 录

1	三维非结构网格的生成及自适应技术	1
1.1	概述	1
1.2	Delaunay 方法和前沿推进发相关介绍	1
1.3	本文方法	2
1.4	Delaunay 三角化的基本原理及性质	3
1.5	由边界点生成原始网格	4
1.6	内部结点的生成及三角化	6
1.6.1	三维背景网格	6
1.6.2	推进生成内部结点	7
1.6.3	内部结点的三角化及前沿的更替	8
1.6.4	网格的光滑处理	9
1.7	Delaunay 三角化时由于误差造成网格生成失败的处理	9
1.8	三维非结构网格的自适应	9
1.9	网格的优化	10
2	Ca^{2+} blink 数值模拟方法	11
2.1	原方程	11
2.2	新方程（不带边界）	17
2.3	新方程（入流边界处）	27
2.4	新方程（出流边界处）	29
附录 1:	举例在二维空间中使用 Bowyer 算法进行 Delaunay 三角化	34
附录 2:	将 f 在空间的分布转变为基函数近似，式中 a, b, c 常数的推导	37

1 三维非结构网格的生成及自适应技术

1.1 概述

非结构网格的基本单元是三角形和四面体。对二维而言，只有三角形能充满任意的二维区域；对三维情形，只有四面体能充满任意的三维区域。非结构网格的生成方法有许多，如 Delaunay 方法、前沿推进法、叉树法、规则划分法等，其中最常用的是 Delaunay 方法和前沿推进法。

在非结构网格的生成方法中，前沿推进法提供了一种很好的布点方式，而 Delaunay 方法则是一种很好的结点连接方法。本文结合两者的优势，提出一种生成三维非结构网格的混合技术——采用前沿推进的方式布点，然后用 Delaunay 三角化方法对结点进行连接。在生成非结构网格时，首先将边界点用 Delaunay 方法连接生成原始网格，然后将边界作为最初的前沿，按照背景网格的信息从前沿向内部推进产生新的结点，新的结点再用 Delaunay 方式引入网格中，再将前沿中原有面用包含它们的新单元的新生成的面代替，继续推进产生新的结点，生成新的网格结构，直到前沿中不再有三角形面存在为止。由于对新生成的结点不是采用传统的前沿推进法的直接连接方式连入网格中，而是用 Delaunay 方法连入网格结构中，因而在推进时，可以一次推进一层产生一组新的结点。这样不仅能按给定尺度分布生成元素过渡光滑的网格，而且网格的生成过程稳定，生成效率高，生成速度快。为了提高网格质量，本文采用 Laplacian 光顺迭代技术，对迭代过程中会出现负体积的情况本文采取对局部区域用 Delaunay 方法进行重连的办法来处理，结果表明这种优化效果较好。

1.2 Delaunay 方法和前沿推进法相关介绍

1、Delaunay 方法

这种方法要求事先知道区域内点的分布，然后用这些已知的点为顶点，根据区域中任意点到这些顶点的距离，将区域分为与顶点数相同的小区域，每个顶点对应一个区域。其原则（Dirichlet 棋盘化原则）是处于一个顶点的区域内的点到该顶点的距离比到其它任意顶点的距离都要小。如果两个顶点的小区域相邻，那么便用一条线段将此二顶点连接起来——对给定的一组点而言，这种连接方式是最优的。这样整个区域便作了三角剖分（二维）或四面体剖分（三维）。这种方法的优点是方便、生成速度快、生成过程稳定、并且网格的质量也比较

好。但需要保证物面的完整性，而且网格结点需另外给定。

2、前沿推进法

这种方法是从已知边界的基础上，根据给定的网格尺度分布，向区域内部推进生成网格。二维区域的边界由一组线段构成的环路组成（三维则是由一组三角形面构成的闭合面）。在初始时，所有的边界构成一“前沿”，前沿上的线段（或面）都可用来作为网格新单元的边（或面）。推进过程永远从前沿向区域内部进行。从边界开始，计算新结点的位置，不断的向前沿中加入新的边（或面），删除旧的边（或面），不断更新的前沿将在区域内部相遇、融合。当前沿中不再有边（或面）存在时，内部区域就被彻底的三角化了。这种方法的优点是不需要进行额外处理以保证物面的完整性，与 Delaunay 方法相比它可以自己生成结点而不需要另外引入，并且在网格尺度的分布控制上有其方便和优越之处。但是每次推进只生成一个新单元，效率很低，而且每生成一个新单元时，都要对新单元进行可行性测试，计算量非常大，在三维情形就更是如此，必须采取很多数值技巧，采用更合理的数据结构。

1.3 本文方法

三维非结构网格的生成方法目前最常用的有两种：一是 Delaunay 三角化方法，它是把空间预先分布的点按 Dirichlet 棋盘化原则连成四面体。其优点是生成效率高，生成过程稳定，生成的网格质量也比较好的。另一种是前沿推进法，它是先生成表面网格，然后以此为初始的前沿向区域内部推进，按背景网格提供的信息自动生成空间点，当前沿内的面为零时，生成也就完成了。与 Delaunay 方法相比，它可以自己生成结点而不需要引入，并且在网格尺度的分布控制上有其方便和优越之处。但是网格生成过程不稳定，生成效率也很低，尤其是查找要花费大量的时间。

从以上的分析可以看出，前沿推进法提供了一种很好的布点方式，而 Delaunay 方法则是一种很好的连接方法。基于这一特点，本文在生成非结构网格时，结合两者的优势，采用前沿推进的方式布点，而用 Delaunay 三角化方法对结点进行连接。在国外有人在二维情形下做过类似的工作。

本文生成非结构网格的具体步骤如下：

- （1）将边界上给定的结点用 Delaunay 方法连接生成原始网格；
- （2）对原始网格进行整理，保证边界面的完整性，消除边界外的单元；

- (3) 整理后的网格，边界面为初始前沿
- (4) 从前沿向区域内部推进布点，此时采取层推进方式，一次产生多个结点；
- (5) 对上述结点进行判断，剔除不合理的点，并将剩下的点引入 Delaunay 结构中，生成新的网格，前沿中原有的三角形面在推进后被包含它们的新单元的新生成的面代替；
- (6) 重复 (4)、(5) 直到前沿中不再包含任何面为止，则网格生成完毕。

下面本文将对以上各点进行详述。

1.4 Delaunay 三角化的基本原理及性质

Delaunay 三角化方法是对给定点集的一种最优化的连接方式，其理论依据是 Dirichlet 棋盘化原则：对于平面上给定的一组点 $\{P_i\}$ ，可以将平面划分为一系列区域，使得每个区域都包含点集 $\{P_i\}$ 中的一个点，且该区域中的任一点与它所包含的这点的距离比与 $\{P_i\}$ 中其它点的距离近。这些区域都是凸多边形的，即所谓 Voronoi 多边形（图 1）。容易看出，Voronoi 多边形的每一条边都是以它为公共边的两个区域所对应的点的中垂线，这样的两个点称为一个点对，将所有这样的点对相连，则整个平面就被三角化了。这就是 Delaunay 三角化的基本原理。

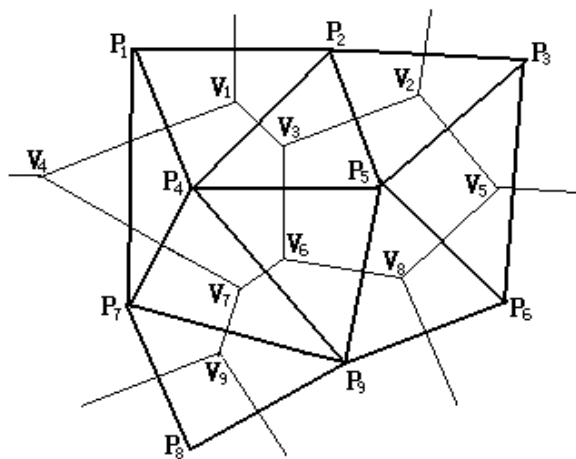


图 1.1 Voronoi 多边形及 Delaunay 三角化单元

由上面的原理可以推出，用 Delaunay 三角化法连成的单元有一个重要的性质：每一个三角形单元的外接圆中都不包含其它的点，在三维情形下则是每个四面体单元的外接球中都不包含其它点。这是 Delaunay 方法的算法基础。关于 Delaunay 三角化网格生成过程有多种算

法，目前大家公认比较好的方法是 Bowyer 算法。

1.5 由边界点生成原始网格

离散化的三维区域边界应是由一个个的三角形面组成的闭合曲面，边界点包括物面点和远场点。

按照 Bowyer 算法，在将边界点用 Delaunay 方法连接起来之前，必须首先给定一个凸外壳包住整个计算区域，并用人工方式将该外壳分为几个四面体，作为最初网格。

对最初的凸外壳，我们选用长方体，并将之分为六个四面体单元。为与正式结点的编号区别，我们对该凸壳的顶点编号采用负数（图 1.2）。

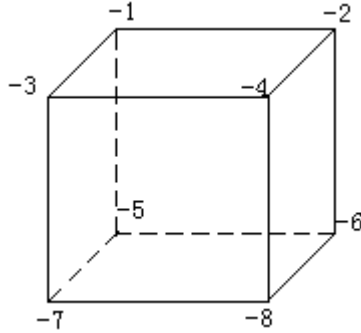


图 1.2 凸壳结点编号

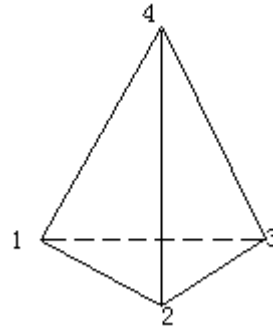


图 1.3 四面体单元的结点局部编号

按照 Bowyer 算法，每插入一个点都要找出其外接球包含插入点的四面体。因此对各单元的存储通过如下的数据结构来进行：

{外心坐标, 外接球半径, 组成单元的四个结点, 单元的四个相邻单元编号}

对组成每个单元的四个结点，我们按照图 1.3 的顺序进行局部编号，按此顺序当采用公式

$$V = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}。计算四面体体积时，得到的 V 值是正数，否则得到的就是负体积值。$$

这样，在引入边界点以前，最初的网格单元有六个(相邻单元编号为 0 表示该方向无单元与其相邻)：

表 1 最初网格单元的数据结构

单元编号	外心及外接球半径	组成的点	相邻的单元
1	$(x,y,z), r$	-1,-2,-3,-5	3,0,0,0
2	$(x,y,z), r$	-7,-6,-5,-2	0,3,6,0
3	$(x,y,z), r$	-2,-3,-5,-7	0,2,5,1
4	$(x,y,z), r$	-6,-7,-8,-4	0,0,6,0
5	$(x,y,z), r$	-4,-3,-2,-7	3,6,0,0
6	$(x,y,z), r$	-4,-6,-7,-2	2,5,0,4

人工给定最初网格后，下面的步骤就是插入边界结点生成原始网格。按照 Bowyer 算法，将点插入网格中的过程如下（附录 1 给出了二维空间按照 Bowyer 算法进行 Delaunay 三角化）：

1. 按随机找一个四面体单元，看它的外接球是否包含待插点，如果不包含，继续搜寻，直到找到一个外接球包含该点的单元为止；
2. 以找到的四面体为基点，搜寻其相邻的单元，判断它们的外接球是否也包含待插点，如果不包含，则停止这个方向的搜索，转向另一个方向；如果包含，则以此四面体为基点开始下一轮的搜寻，直到各方向都搜寻完为止；
3. 搜寻到的这些四面体单元都将被打破，而留下一个由一系列三角形面组成的空腔，即所谓 Delaunay 空腔；
4. 把 Delaunay 空腔的每一个面都与待插点连接起来，生成新的四面体单元；
5. 对新单元进行整理，加入到上述数据结构中，则该点插入完毕

重复以上步骤，将所有边界点都加入网格中后，接下来就要对该网格进行整理。整理的过程包括保证物面的完整性以及消除边界外的四面体。整理的步骤是：

1. 判断每一个边界面的三个点是否包含于网格的某一个单元中，如是则该表面单元存在，否则就不存在；
2. 对不存在的边界单元在其中心处插入一个点加入网格中，同时该单元也进行分裂；
3. 重复上述步骤，直到所有的边界面都存在；
4. 经过上述处理，每个边界面都应为两个单元所包含，很容易区分出这两个单元谁在边界

外，谁在区域内，我们将前者用 0 标记，将后者用 1 标记。将所有这些单元都标记完毕后，通过这些单元向四周搜寻，凡是与标记为 0 的单元相邻且不包含边界面的单元，都用 0 标记，而凡是与标记为 1 的单元相邻且不包含边界面的单元，都用 1 标记，直到所有单元标记完毕，这样，我们就将所有单元以边界面为界限，分为了两大类：

5. 所有标记为 0 的单元都是在区域外的，将它们都从网格中删除，并重新整理网格结构；
6. 将第 2 步在物面上新插入的点剔除，将包含该点的单元重连，恢复物面。

这样，就得到了由边界点组成的原始网格，且所有单元都在计算区域内部。在下面的过程中，当引入内部结点时，如果某个包含边界面的单元要被删除，则该边界面会自动作为 Delaunay 空腔的一个面，参与组成新的四面体单元，因而边界的完整性不会被破坏了。

1.6 内部结点的生成及三角化

1.6.1 三维背景网格

由于本文对内部结点的生成，采用的是前沿推进法的方式，因而必须有背景网格来提供空间的尺度分布信息。背景网格应覆盖整个计算区域。当生成初网格时，我们可以选取一些有代表性的点，并定好各点上的尺度参数，然后将它们用 Delaunay 方法连接起来作为背景网格。当生成自适应网格时，则可以用初网格作为背景网格。

当背景网格生成好以后，对域内任一点的控制参数的获得是通过线性插值而得到的，具体的作法是：1) 找出包含该点的背景网格单元，其标识是该点与所找到的四面体的四个面所构成的体积值均为正或这四个四面体的体积的绝对值之和不大于该背景网格四面体单元的体积；2) 对该点进行线性插值得到所需的尺度参数,插值公式是

$$\delta_P = (\delta_D \times V_{ABCP} + \delta_C \times V_{ADBP} + \delta_B \times V_{ACDP} + \delta_A \times V_{BDPC}) / V_{ABCD} \quad (1.6.1)$$

其中， δ_P 为插值点 P 的尺度参数， δ_A 、 δ_B 、 δ_C 、 δ_D 为背景网格单元的四个顶点 A、B、C、D 上的尺度参数， V_{ABCD} 为该背景网格单元体积， V_{ABCP} 、 V_{ADBP} 、 V_{ACDP} 、 V_{BDPC} 为 P 与该背景网格单元的四个面所构成的四面体体积。

1.6.2 推进生成内部结点

前沿中的每个面都可用于推进生成新结点、新单元，我们称之为“活跃的面”。

从前沿中选择一个三角形面作为推进的基面，设为面 ABC(如图 1.4 所示)，(在前沿推进法中，通常要选择最小的面，这样是为了使得前沿提前相遇的可能性降到最小，以避免生成过多的畸形单元)。设

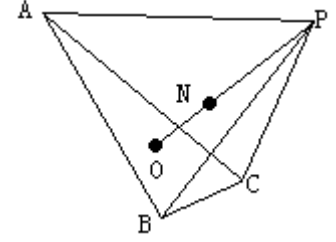


图 1.4

点 O 是面 ABC 的外接圆圆心， r 是其外接圆半径， \overrightarrow{ON} 是该面的指向前沿所包围的区域内部的单位法向向量，用背景网格插值，可以得到点 O 上的尺度参数 $\delta(O)$ ，从 O 点作有向线段 \overrightarrow{OP} ，使其长度 h 满足：

$$h = \begin{cases} r, & \text{当 } 0 < \delta(O) < r \\ \delta(O), & \text{当 } r < \delta(O) < 3r \\ 3r, & \text{当 } 3r < \delta(O) \end{cases}$$

之所以对 h 作出这样的限制，是为了避免单元过于畸形。

按照传统的前沿推进法，由面 ABC 推进生成新结点 P 的同时，点 P 将直接与面 ABC 的三个顶点连接而形成一个新的四面体单元 PABC，当然，对于这个新结点和新单元，还要进行可行性判断，如果新单元和前沿相交或者该单元中包含前沿点，又或点 P 与前沿点距离太近，那么点 P 就不能参与构成新单元，而应用相应的前沿点来代替它构成新单元。对于三维问题而言，这些工作的计算量非常大。而且，由于前沿包围的空间是一个尚未被离散化的空腔，这也给判断前沿是否相遇，以及判断网格是否生成完毕增加了困难。

本文由于只是采用前沿推进的方式来生成结点，不是采用传统的前沿推进法连接结点的方式来生成新单元，而是随后将新结点用 Delaunay 方法连入网格中，因此处理方式比之原始的前沿推进法更加灵活。在由前沿向前推进时，不必选取前沿中最小的面作为起始面来推进，而是可以同时从前沿中的每一个面向前推进生成新的结点，一次推进一层，既提高了效率，又避免了对前沿中的面按大小进行排序。当然，为了保证网格的质量，对新生成的结点还要进行一些处理：如图 1.6，从面 ABC 推进生成点 P 后，通过背景网格插值，可求得该点上的尺度 δ_P ，以 P 为圆心， $0.5\delta_P$ 为半径作球，查找是否有结点位于该球内，若有，则不要

点 P ，若无，则再对四面体 $PABC$ 进行判断，查找是否有结点位于其外接球内，如果有，则也不要点 P ，否则点 P 将作为新的结点引入到外接球中。如果点 P 在边界附近，还要判断它是否与某个边界相距过小，如果小于 $0.5\delta_p$ ，则 P 也不能加入网格。由于前面在由边界结点生成初始网格时，采用 Delaunay 方式进行连接，因而整个计算区域的空间都被四面体充满了，这样，再按照本文前面的数据结构，进行这些查找和判断的工作量并不大。

1.6.3 内部结点的三角化及前沿的更替

当从前沿推进一次，生成一批新的结点后，就要将它们用 Delaunay 方式加入到三角化网格结构中，形成新的结构。内部结点的插入过程与 1.5 节中边界点插入网格中的过程一样，这里就不再论述了。

当新的结构形成后，前沿也要进行更替了。由于我们在推进时，一次向前推进一层，前沿中的每个活跃的面都参与了本次的推进，因此这些面都应作为不活跃的面从前沿中去掉，这些不活跃的面以后不能再次纳入前沿中。新的前沿将由包含不活跃的面新单元的新生成的面来组成。当然，如果某个单元不是该次推进后更新三角化结构生成的新单元，但是它有部分面为不活跃的面，那么剩下的面也将作为活跃面加入新的前沿中。但是有几种情况需要注意：1) 如图 1.5a 所示，如果我们确定新前沿时，有三个活跃的面 DAB 、 DBC 、 DCA 属于同一个四面体单元 $DACB$ ，而这个单元的另一个面不是不活跃的面，那么我们就规定这三个面将作为不活跃面（虽然它们并未参与上次的推进），而该四面体的另一个面 ABC 将作为活跃面加入新的前沿；2) 如图 1.5b，对于新结构中的两个单元 $ABCP$ 与 $BDCP$ ，若只有 ABC 与 BDC 是不活跃的面，那么我们在确定新的前沿时， BCP 将被规定为不活跃的面而不加入前沿；3) 按照我们前面的原则确定新前沿时，如果某个单元的四个面都作为了活跃的面加入前沿，这时就是所谓前沿相遇，这四个面也将被规定为不活跃面，从前沿中去掉。前沿不断更替，不断的生成新的结点插入网格中，直到前沿中不再有活跃的面为止，则推进完毕。

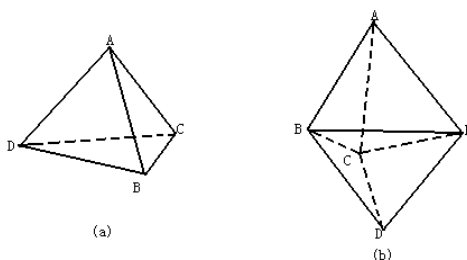


图 1.5

1.6.4 网格的光滑处理

按照上面这种层推进，对于网格尺度变化剧烈的区域，难免会有一些因尺度过渡不够光滑而导致的畸形单元，对于这些地方还要做一些特殊处理。本文对于这些地方的畸形单元，采取在其外心处加入新的结点插入网格中的方法来使得网格的尺度过渡光滑化。

1.7 Delaunay 三角化时由于误差造成网格生成失败的处理

在实际的计算中，由于计算误差的存在，因而有可能造成搜寻其外接球包含待插点的四面体时发生判断错误，把本来其外接球不包含待插点的四面体搜寻了进来，或把本来其外接球包含待插点的四面体判断为外接球不包含待插点，这时一般是待插点刚好位于球面附近，因而发生了判断错误，这种情形在二维情况下很少见，但是在三维中却是经常出现的。这样就会导致出现下面这种情况：两个相邻的单元 $ABCD$ 和 $ACBE$ ，待插点 P 在它们两者的外接球附近，由于误差，判断时将 $ABCD$ 搜寻了进来，而 $ACBE$ 则判断为外接球不包含待插点，这样将形成一个新单元 $ABCP$ 与 $ACBE$ 相邻，而事实上点 P 和 E 在面 ABC 的同侧（图 1.6），这就导致网格生成失败。

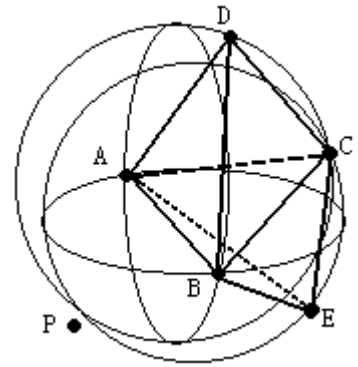


图 1.6

对这类情况，本文的处理方式是：1) 在判断一个单元的外接球是否包含待插点时，加一个正小量，将所有外接球包含待插点或待插点在其外接球球面附近的单元都搜寻进来；2) 以待插点为基点，将搜寻到的四面体都打破，形成 Delaunay 空腔；3) 对 Delaunay 空腔中的每个面，计算它们与待插点所构成的四面体的体积（按照 2.3 节的公式），如果体积为负值，就表明出现了上面所说的那种情况，4) 找出出现这种情况的面是由哪个四面体被打破而行成的，并将该四面体从搜寻到的单元序列中释放出来，重新加入网格中，然后重新对序列中剩下的单元进行打破，得到新的 Delaunay 空腔。5) 重复步骤 3、4，直到 Delaunay 空腔中的每个面与待插点构成的四面体体积都为正值。

1.8 三维非结构网格的自适应

本文采用了重新生成网格的方法来实现自适应加密。生成自适应网格的过程与生成初网格的过程是完全一样的，生成自适应网格所用的背景网格是初网格。

现在问题的关键是要在背景网格即初网格的结点上给出尺度参数。如何根据初网格上的计算结果确定其结点上的尺度呢？直观的说，我们希望在解变化剧烈的地方，网格取得密些，而在变化平缓的地方，则取得疏些。为此，本文选取了密度的梯度的大小 $|\nabla\rho|$ 来作为标准，对于背景网格上的一个结点，其上的尺度 h 应满足

$$h \times |\nabla\rho| = \text{常数} \quad (1.8.1)$$

显然，在均匀流动区，由于密度梯度小，计算的尺度 h 将很大，而在激波附近，由于密度的梯度大，计算的尺度 h 将很小。在实际应用中，对于尺度值给定了上界及下界，以避免生成过分畸形的单元。

1.9 网格的优化

对于已经生成好的四面体网格，如果对其中的部分单元形状或者结点分布不满意，可以对网格的结点坐标略作调整，这就是网格的优化技术。对于尺度变化剧烈的网格（例如自适应网格）而言，在网格生成过程中，会不可避免的形成一些畸形的单元，因而，对网格进行优化是必不可少的。

本文在对结点进行调整时，采用的是 Laplacian 光顺法：对于一个内部结点 $P_i(x_i, y_i, z_i)$ ，设与之相连的结点总数为 N ，则光顺迭代技术如下：

$$x_i^{(n+1)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_{ik}^{(n)}, \quad y_i^{(n+1)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N y_{ik}^{(n)}, \quad z_i^{(n+1)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N z_{ik}^{(n)} \quad (1.9.1)$$

其中，上标 (n) 表示第 n 次迭代结果， (x_{ik}, y_{ik}, z_{ik}) 表示与 P_i 相连的第 k 个结点坐标。

经过上面这种迭代，网格总体的质量会得到很大的改善。但是在三维情况下，每迭代一次，往往都会导致一些单元出现负体积。为解决这个问题，本文在每迭代一次后，都对出现负体积单元的区域用 Delaunay 方法进行局部重连，以保证网格的正确性。对于优化前后网格质量的评估，本文引进了一个评估标准：四面体的每个面对应一个高 h ，该面的大小用它的外接圆半径 r 来衡量，定义参数 $hr=h/r$ ，对每个四面体而言，它有四个这样的参数，我们取其中最小的一个来作为评估该单元的标准，记为 $hrmin$ 。这个值越大，就说明该单元越接近正四面体。表 1.2 是 Hermes 外形的简化航天飞机的自适应网格在光顺前后的网格单元质量比较。从这个比较可以看出，光顺过后结点的局部分布情况更为合理，网格的质量也有

了明显的改善。

表 1.2 Hermes 外形自适应网格在光顺前后的网格单元质量比较

<i>hrmin</i>	1.2 以上	1.0–1.2	0.8–1.0	0.65–0.8	0.5–0.65	0.5 以下
光顺前	4.7%	22.6%	34.9%	21.3%	10.4%	6.1%
光顺后	9.6%	42.5%	35.4%	9.6%	2.0%	0.9%

2 Ca^{2+} blink 数值模拟方法

2.1 原方程

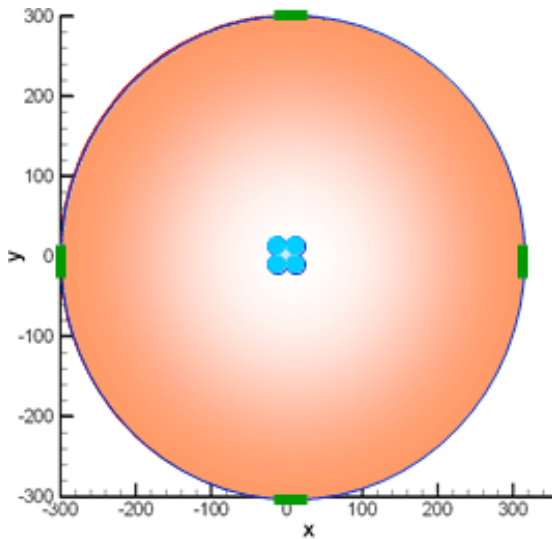


图 1 肌浆网结构示意图

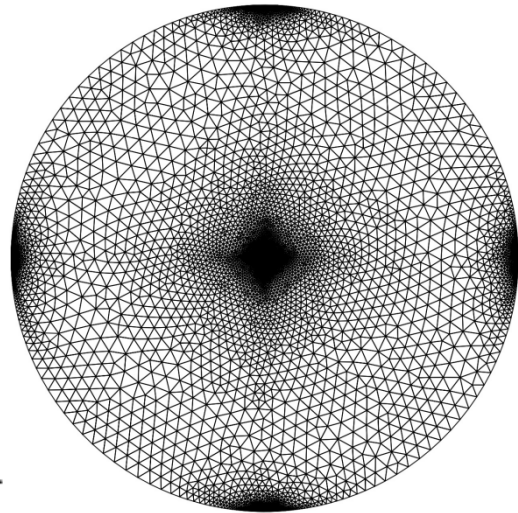


图 2 离散化后的网格

肌浆网内钙离子浓度扩散方程：

$$\frac{\partial [\text{Ca}^{2+}]_{jSR}}{\partial t} = J_{diffusion} + J_{buff} + J_{RyR} + J_{refill}$$

(1)

其中：

$$1. J_{diffusion} = D_{Ca} \times \nabla^2 [\text{Ca}^{2+}]_{jSR} = D_{Ca} \times \left(\frac{\partial^2 [\text{Ca}^{2+}]_{jSR}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 [\text{Ca}^{2+}]_{jSR}}{\partial y^2} \right)$$

2. J_{RyR} 是 RyR 通道向肌浆网外释放钙离子的流量。
3. J_{refill} 是 fSR 向 jSR 补充 Ca^{2+} 的流量。
4. J_{RyR}, J_{refill} 这两个量只在 RyR 和 fSR 边界处才有，其它地方为 0。
5. J_{buff} 是钙离子被其他蛋白结合的量，被结合之后，自由钙离子浓度 $[Ca^{2+}]$ 会减少。

$$J_{buff} = -\frac{\partial[Ca^{2+}]_{jSR}}{\partial t} \times \frac{[B_{CSQ}]_{tot} \times K_{d,CSQ}}{(K_{d,CSQ} + [Ca^{2+}]_{jSR})^2}。$$

为书写方便，(1) 方程写成 (2) 方程（除 RyR 和 fSR 边界处要加上相应量外）：

$$\left(1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}\right) \times \frac{\partial f}{\partial t} = D \times \nabla^2 f$$

(2)

其中：

1. B, K, D 都是常数。
2. f 是钙离子的浓度，即 $[Ca^{2+}]_{jSR}$ ， $f = f(x, y, t)$ 。
3. ∇^2 即拉普拉斯算子， $\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ 。

数值求解方程：

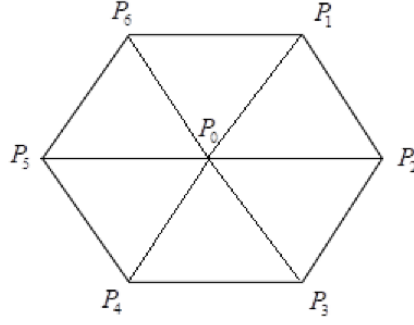
从 $t=0$ 时刻起，按固定的时间间隔 Δt （比如 1 微秒），计算每个时间点 $t=t_1$ 处各个 x, y 对应的 $f(x, y, t_1)$ 的值。当 $t=0$ 时， $f(x, y, 0)$ 通常已知，也就是初始条件。

因为偏微分方程的理论解求解很困难，数值求解就是用一系列合理的近似处理将解偏微分方程变成解普通方程。因为二阶导数进行近似，误差很大，所以首先通过空间积分将对 x, y 的二阶导数变成一阶导数。

$$\iint_V \left[\left(1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}\right) \times \frac{\partial f}{\partial t} \right] dV = \iint_V (D \times \nabla^2 f) dV$$

(3)

(3) 式中, V 为控制面积 (如下图, 我们将空间离散化为三角形单元后, 每一个点被多个三角形单元包围着, 比如下图中, 点 P_0 被 6 个三角形单元包围着。我们取这 6 个三角形单元为控制面积, 也就是六边形 $P_1P_2P_3P_4P_5P_6$ 为点 P_0 的控制面积)



根据高斯定律 (高斯散度定理),

$$D \iiint_V (\nabla^2 f) dV = D \iiint_V (\nabla \cdot \nabla f) dV = D \oint_S (\nabla f \cdot \vec{n}) dS$$

(4)

其中:

1. V 为六边形 $P_1P_2P_3P_4P_5P_6$ 的面积
2. S 为控制面积的边界, 也就是六条边 $P_1-P_2-P_3-P_4-P_5-P_6$ 。
3. \vec{n} 为每段边界的垂直向量。
4. ∇f 为 f 的梯度, 即一阶导数向量 $(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y})$ 。

那么方程 (4) 变为

$$[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}] \times \frac{\partial f}{\partial t} \times V = D \times \sum_{i=1}^6 [(n_{ix} \times \frac{\partial f}{\partial x} + n_{iy} \times \frac{\partial f}{\partial y}) \times L_i]$$

(5)

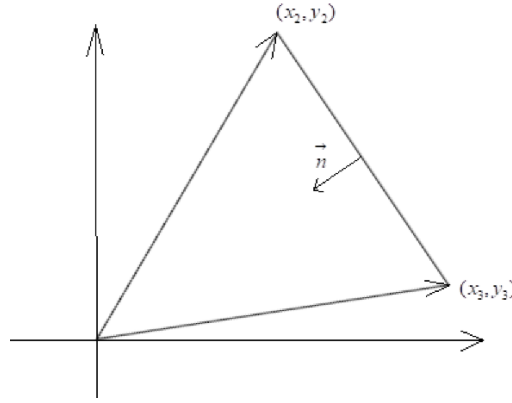
其中:

1. L_i 为第 i 条边长度。

2. n_{ix} , n_{iy} 为第 i 条边的垂直向量

（注：根据网格划分不同，实际每个节点的控制面积可能为三角形、四边形、五边形或其他情况）

那么如何处理等式右边 n_{ix} , n_{iy} 和 L_i 相乘？举例下图是一个三角形单元：



设 $\vec{n} = (a, b)$ ，那么 $a(x_3 - x_2) + b(y_3 - y_2) = 0$ ，可以设 $\begin{cases} a = y_2 - y_3 \\ b = x_3 - x_2 \end{cases}$ ，使方程成立。那么

$\vec{n} = (n_{ix}, n_{iy}) = (y_2 - y_3, x_3 - x_2)$ 。标准化后得：

$$\begin{aligned} \vec{n}' &= \frac{(y_2 - y_3, x_3 - x_2)}{\sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2}} \\ &= \left(\frac{y_2 - y_3}{\sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2}}, \frac{x_3 - x_2}{\sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2}} \right) \end{aligned}$$

又因为 $L_i = \sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2}$ （ L_i 为不包含这个点的那条边），

那么 $\begin{cases} n_{ix} \cdot L_i = y_2 - y_3 \\ n_{iy} \cdot L_i = x_3 - x_2 \end{cases}$

将 f 在空间的分布转变为基函数近似（对某个时刻 $t = t_0$ 时， $f(x, y, t_0)$ 可以用每个三角元顶点的三个值近似为一阶多项式）

$$\begin{aligned}
f(x, y, t_0) = & f(x_1, y_1, t_0) \times (a_1 + b_1 x + c_1 y) \\
& + f(x_2, y_2, t_0) \times (a_2 + b_2 x + c_2 y) \\
& + f(x_3, y_3, t_0) \times (a_3 + b_3 x + c_3 y)
\end{aligned} \tag{6}$$

将 $f(x_1, y_1, t_0)$, $f(x_2, y_2, t_0)$, $f(x_3, y_3, t_0)$ 分别简写为 f_1 , f_2 , f_3 后,

那么

$$\begin{aligned}
f(x, y, t_0) = & f_1 \times (a_1 + b_1 x + c_1 y) \\
& + f_2 \times (a_2 + b_2 x + c_2 y) \\
& + f_3 \times (a_3 + b_3 x + c_3 y)
\end{aligned} \tag{7}$$

其中, $a_i + b_i x + c_i y$ 是一阶多项式基函数, a_i , b_i , c_i 是常数, 这部分的推导见附录 2。那么拆开括号并合并后得:

$$f(x, y, t_0) = (f_1 a_1 + f_2 a_2 + f_3 a_3) + (f_1 b_1 + f_2 b_2 + f_3 b_3)x + (f_1 c_1 + f_2 c_2 + f_3 c_3)y \tag{8}$$

在这个三角元内分别对 x, y 求偏导,

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = f_1 b_1 + f_2 b_2 + f_3 b_3 \\ \frac{\partial f}{\partial y} = f_1 c_1 + f_2 c_2 + f_3 c_3 \end{cases} \tag{9}$$

将 (9) 代入微分方程 (5) 后得到

$$[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}] \times \frac{\partial f}{\partial t} \times V = D \times \sum_{i=1}^6 \{ [n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i \} \tag{10}$$

对时间 t 的处理:

假设 $t = n \cdot \Delta t$ 时刻的 $f(x, y, n\Delta t)$ 已经经过计算得到, 为了计算下一时刻的 $f[x, y, (n+1)\Delta t]$ 的分布, 需将方程作进一步处理。

计算 $f_{n+\frac{1}{2}}$:

首先, $1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}$ 中有 f , 会使求解复杂化, 将这个系数中 f 取 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 时刻的估计值

会使结果更优化, 为此先计算 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 时近似估计值。

$$[1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times \frac{f_{n+\frac{1}{2}} - f_n}{\frac{1}{2}\Delta t} \times V = D \times \sum_{i=1}^6 \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} \quad (11)$$

(11) 式中将 $f[x, y, (n + \frac{1}{2})\Delta t]$ 简写为 $f_{n+\frac{1}{2}}$, 将 $f(x, y, n\Delta t)$ 简写为 f_n 。对 (11) 式等号右边各

f 的值按照 $n\Delta t$ 时刻取值, 这样通过解方程可得 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 的值为如下式所示。

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \frac{D \times \sum_{i=1}^6 \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} \times \Delta t}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n \quad (12)$$

计算 f_{n+1} :

$$[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times \frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta t} \times V = D \times \sum_{i=1}^6 \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} \quad (13)$$

将 (13) 式右边将每个 f 取值为 n 和 $n+1$ 时刻的均值, 这些可得 f_n 的方程, 解之可得:

$$f_{n+1} = \frac{D \times \sum_{i=1}^6 \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} \times \Delta t}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n \quad (14)$$

2.2 新方程（不带边界）

$$\begin{cases} \frac{\partial [Ca^{2+}]_{jSR}}{\partial t} = D_{Ca} \times \nabla^2 [Ca^{2+}]_{jSR} + J_{buff} + J_{RyR} + J_{refill} + J_{dye} \\ \frac{\partial [CaF]_{jSR}}{\partial t} = D_F \times \nabla^2 [CaF]_{jSR} - J_{dye} \end{cases}$$

其中：

1. 将 $[Ca^{2+}]_{jSR}$ 简写为 f ，将 $[CaF]_{jSR}$ 简写为 g ，那么拉普拉斯算子写为

$$\nabla^2 [Ca^{2+}]_{jSR} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}, \quad \nabla^2 [CaF]_{jSR} = \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial y^2}$$

$$2. J_{buff} = -\frac{\partial [Ca^{2+}]_{jSR}}{\partial t} \times \frac{[B_{CSQ}]_{tot} \times K_{d,CSQ}}{(K_{d,CSQ} + [Ca^{2+}]_{jSR})^2}$$

$$3. \begin{aligned} J_{dye} &= -K_F^+ \times [Ca^{2+}]_{jSR} \times ([F]_T - [CaF]_{jSR}) + K_F^- \times [CaF]_{jSR} \\ &= -K_F^+ \times f \times (F - g) + K_F^- \times g \end{aligned}$$

式中用 F 代替 $[F]_T$

$$4. J_{refill} = K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{jSR} - [Ca^{2+}]_{cyto})$$

$$5. J_{RyR} = -K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{jSR} - [Ca^{2+}]_{cyto})$$

6. 常数包括：

$$[Ca^{2+}]_{cyto} = 0.0001, [Ca^{2+}]_{fSR} = 1.0, K_{RyR} = 6.5 \times 10^7, K_{fSR} = 0.785 \times 10^6,$$

$$[B_{CSQ}]_{tot} = 14, K_{d,CSQ} = 0.63, D_{Ca} = 3.5 \times 10^8, D_F = 2.0 \times 10^7, K_F^+ = 1000,$$

$$K_F^- = 400, [F]_T = 0.1$$

7. J_{RyR} 只在出流边界有，其他地方为 0

8. J_{refill} 只在入流边界有，其他地方为 0

要求解的量是 $[Ca^{2+}]_{jSR}$ 和 $[CaF]_{jSR}$ ，按照 2.1 的步骤解方程。

初始条件：t=0 时刻， $[Ca^{2+}]_{jSR} = 1.0$ ， $[CaF]_{jSR} = 0.0909$

计算 $[Ca^{2+}]_{jSR}$ ：

1. 将第一个方程简写

$$\left[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}\right] \cdot \frac{\partial f}{\partial t} = D_{Ca} \times \nabla^2 f + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)$$

2. 二阶导数进行近似，误差很大，通过空间积分将二阶导数变成一阶导数， V 为控制面积，设控制面积有 m 个三角形

$$\begin{aligned} \iint_V \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}\right] \times \frac{\partial f}{\partial t} dV &= \iint_V [D_{Ca} \times \nabla^2 f + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] dV \\ &= D_{Ca} \times \iint_V (\nabla^2 f) dV + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V \end{aligned}$$

3. 根据高斯定律（高斯散度定理），

$$D_{Ca} \cdot \iint_V (\nabla^2 f) dV = D_{Ca} \cdot \iint_V (\nabla \cdot \nabla f) dV = D_{Ca} \cdot \oint_S (\nabla f \cdot \vec{n}) dS$$

4. 代入步骤2，得

$$\left\{ \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}\right] \times \frac{\partial f}{\partial t} + K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g \right\} \times V = D \times \sum_{i=1}^m \left[(n_{ix} \times \frac{\partial f}{\partial x} + n_{iy} \times \frac{\partial f}{\partial y}) \times L_i \right]$$

5. 将 f 在空间的分布转变为基函数近似（对某个时刻 $t=t_0$ 时， $f(x, y, t_0)$ 可以用每个三角元顶点的三个值近似为一阶多项式）

$$\begin{aligned} f(x, y, t_0) &= f(x_1, y_1, t_0) \times (a_1 + b_1 x + c_1 y) \\ &\quad + f(x_2, y_2, t_0) \times (a_2 + b_2 x + c_2 y) \\ &\quad + f(x_3, y_3, t_0) \times (a_3 + b_3 x + c_3 y) \end{aligned}$$

将 $f(x_1, y_1, t_0)$ ， $f(x_2, y_2, t_0)$ ， $f(x_3, y_3, t_0)$ 分别简写为 f_1 ， f_2 ， f_3 后，那么

$$\begin{aligned} f(x, y, t_0) &= f_1 \times (a_1 + b_1 x + c_1 y) \\ &\quad + f_2 \times (a_2 + b_2 x + c_2 y) \\ &\quad + f_3 \times (a_3 + b_3 x + c_3 y) \end{aligned}$$

其中， $a_i + b_i x + c_i y$ 是一阶多项式基函数， a_i ， b_i ， c_i 是常数，拆开括号并合并后得：

$$f(x, y, t_0) = (f_1 a_1 + f_2 a_2 + f_3 a_3) + (f_1 b_1 + f_2 b_2 + f_3 b_3) x + (f_1 c_1 + f_2 c_2 + f_3 c_3) y$$

在这个三角元内分别对 x, y 求偏导，

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = f_1 b_1 + f_2 b_2 + f_3 b_3 \\ \frac{\partial f}{\partial y} = f_1 c_1 + f_2 c_2 + f_3 c_3 \end{cases}$$

6. 将上述一阶偏导代入步骤 4, 得

$$\begin{aligned} & \{[1 + \frac{B \times K}{(K + f)^2}] \times \frac{\partial f}{\partial t} + K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g\} \times V = \\ & D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} \end{aligned}$$

7. 对时间 t 的处理, 计算 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 时近似估计值

$$\begin{aligned} & \{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times \frac{f_{n+\frac{1}{2}} - f_n}{\frac{1}{2}\Delta t} + K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g\} \times V = \\ & D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} \end{aligned}$$

8. 计算 $f_{n+\frac{1}{2}}$

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n$$

9. 计算 $(n+1)\Delta t$ 时近似估计值

$$\begin{aligned} & \{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times \frac{f_{n+1} - f_{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g\} \times V = \\ & D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} \end{aligned}$$

10. 计算 f_{n+1}

$$f_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_{n+\frac{1}{2}}$$

针对误差的优化 1:

由于上面求 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 和 f_{n+1} 的方程中, D_{Ca} 是个很大的数值, $\frac{\Delta t \cdot D_{Ca}}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V}$ 的结果也比

较大, f_{1i} 、 f_{2i} 和 f_{3i} 数值中有一个很小的误差就会使结果发散。所以对上述方程改动如下:

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n$$

在中心点所控制的每个三角形中, 如果所求中心点为第 i 个三角形中第 1 个点, 则把该三角形的 f_{1i} 移到等号左边并用 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 代替; 如果所求中心点为第 i 个三角形中第 2 个点, 则把该

三角形的 f_{2i} 移到等号左边并用 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 代替; 如果所求中心点为第 i 个三角形中第 3 个点, 则把

该三角形的 f_{3i} 移到等号左边并用 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 代替。

为方便写方程, 这里假设中心点控制的每个三角形中, 第 1 个点为中心点。在代码中, 需要对每个三角形的三个点作判断是否为中心点。将第 1 个点移至左边。

$$f_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{1i} b_{1i} + n_{iy} \times f_{1i} c_{1i}) \times L_i]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n$$

将 f_{1i} 替换为 $f_{n+\frac{1}{2}}$, 对于等式左边:

$$\begin{aligned}
& f_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{li} b_{li} + n_{iy} \times f_{li} c_{li}) \times L_i]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} \\
&= f_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{n+\frac{1}{2}} \times b_{li} + n_{iy} \times f_{n+\frac{1}{2}} \times c_{li}) \times L_i]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} \\
&= f_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot f_{n+\frac{1}{2}} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{li} + n_{iy} \times c_{li}) \times L_i]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} \\
&= f_{n+\frac{1}{2}} \times \{1 - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{li} + n_{iy} \times c_{li}) \times L_i]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V}\}
\end{aligned}$$

代回到方程，化简：

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \cdot (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \cdot (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \cdot L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + f_n \times 2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \cdot L_i]}$$

同样，对 f_{n+1} 也作相同处理（等式右边 f_{2i} 、 f_{3i} 要取 $n + \frac{1}{2}$ 时刻的值）：

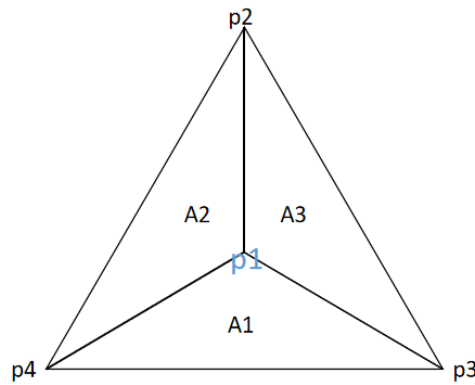
$$f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{li} b_{li} + n_{iy} \times f_{li} c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n$$

将 f_{li} 替换为 f_{n+1} ，对于等式左边：

$$\begin{aligned}
& f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{1i} b_{1i} + n_{iy} \times f_{1i} c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} \\
&= f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times f_{n+1} \times b_{1i} + n_{iy} \times f_{n+1} \times c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} \\
&= f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot f_{n+1} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{1i} + n_{iy} \times c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} \\
&= f_{n+1} \times \{1 - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{1i} + n_{iy} \times c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}\}
\end{aligned}$$

代回到方程，化简：

$$f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \cdot (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \cdot (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \cdot L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + f_n \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i]}$$



A1: 1号顶点p1, 2号顶点p3, 3号顶点p4
A2: 1号顶点p2, 2号顶点p1, 3号顶点p4
A3: 1号顶点p2, 2号顶点p3, 3号顶点p1

实际情况中，所求中心点不可能是每个三角形单元的 1 号顶点，正如下图所示。为更加清

晰地说明方程的计算方式，针对 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 的计算特举此例，其余方程的数值替换方式相同。

图中 p1 所求中心点，围绕它的有三个三角形单元 A1、A2、A3。p1 为三角形单元 A1 的 1 号顶点，A2 的 2 号顶点，A3 的 3 号顶点，则方程中式(1)部分需改写为式(2)。

$$\sum_{i=1}^3 \{ [n_{ix} \times (f_{1i} b_{1i} + f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i} c_{1i} + f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i \} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[n_{1x} \cdot (f_{n+\frac{1}{2}} b_{11} + f_{21} b_{21} + f_{31} b_{31}) + n_{1y} \cdot (f_{n+\frac{1}{2}} c_{11} + f_{21} c_{21} + f_{31} c_{31}) \right] \times L_1 \right\} \\ & + \left\{ \left[n_{2x} \cdot (f_{12} b_{12} + f_{n+\frac{1}{2}} b_{22} + f_{32} b_{32}) + n_{2y} \cdot (f_{12} c_{12} + f_{n+\frac{1}{2}} c_{22} + f_{32} c_{32}) \right] \times L_2 \right\} \\ & + \left\{ \left[n_{3x} \cdot (f_{13} b_{13} + f_{23} b_{23} + f_{n+\frac{1}{2}} b_{33}) + n_{3y} \cdot (f_{13} c_{13} + f_{23} c_{23} + f_{n+\frac{1}{2}} c_{33}) \right] \times L_3 \right\} \quad (2) \end{aligned}$$

然后移项、提取 $f_{n+\frac{1}{2}}$ ，最后计算得到 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 。

针对误差的优化 2:

在原计算 f_{n+1} 的方程中，等式右边 f_{2i} 、 f_{3i} 取 $n + \frac{1}{2}$ 时刻的值，移到等式左边的 f_{1i} 取 $n + 1$ 时刻的值，为了减少在出流阶段之后造成的新的误差，现改为等式右边 f_{2i} 、 f_{3i} 依旧取 $n + \frac{1}{2}$ 时刻的值，移到等式左边的 f_{1i} 取 n 和 $n + 1$ 时刻的平均值（接近于 $n + \frac{1}{2}$ 时刻），即 $\frac{f_n + f_{n+1}}{2}$ 。

$$f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot \frac{f_n + f_{n+1}}{2} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot \frac{f_n + f_{n+1}}{2} \cdot c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n$$

等式左边：

$$\begin{aligned}
& f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot \frac{f_n + f_{n+1}}{2} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot \frac{f_n + f_{n+1}}{2} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} \\
& = f_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \frac{f_{n+1}}{2} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i] + \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \frac{f_n}{2} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} \\
& = f_{n+1} \cdot (1 - \frac{\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}) - \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \frac{f_n}{2} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}
\end{aligned}$$

将等式左边的常数项移到右边，并化简：

$$\begin{aligned}
& f_{n+1} \cdot (1 - \frac{\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}) = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \times L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V + \frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n \\
& f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \cdot (f_{2i} b_{2i} + f_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \cdot (f_{2i} c_{2i} + f_{3i} c_{3i})] \cdot L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + f_n \cdot [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V + \frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} - \frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \cdot L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V}
\end{aligned}$$

对 F_n 方程最新的改动见 2.4 节。

计算 $[CaF]_{jSR}$ ：

1. 将第二个方程简写

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D_F \times \nabla^2 g + K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g$$

2. 二阶导数进行近似，误差很大，通过空间积分将二阶导数变成一阶导数， V 为控制面积，设控制面积有 m 个三角形

$$\iint_V [\frac{\partial g}{\partial t} + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] dV = D_F \times \iint_V (\nabla^2 g) dV$$

3. 根据高斯定律（高斯散度定理），

$$D_F \cdot \iint_V (\nabla^2 g) dV = D_F \cdot \iint_V (\nabla \cdot \nabla g) dV = D_F \cdot \oint_S (\nabla g \cdot \vec{n}) dS$$

4. 代入步骤 2，得

$$\left[\frac{\partial g}{\partial t} + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)\right] \times V = D_F \times \sum_{i=1}^m \left[(n_{ix} \times \frac{\partial g}{\partial x} + n_{iy} \times \frac{\partial g}{\partial y}) \times L_i\right]$$

5. 将 g 在空间的分布转变为基函数近似（对某个时刻 $t=t_0$ 时， $g(x,y,t_0)$ 可以用每个三角元顶点的三个值近似为一阶多项式）

$$\begin{aligned} g(x,y,t_0) &= g(x_1,y_1,t_0) \times (a_1 + b_1x + c_1y) \\ &\quad + g(x_2,y_2,t_0) \times (a_2 + b_2x + c_2y) \\ &\quad + g(x_3,y_3,t_0) \times (a_3 + b_3x + c_3y) \end{aligned}$$

将 $g(x_1,y_1,t_0)$ ， $g(x_2,y_2,t_0)$ ， $g(x_3,y_3,t_0)$ 分别简写为 g_1 ， g_2 ， g_3 后，那么

$$\begin{aligned} g(x,y,t_0) &= g_1 \times (a_1 + b_1x + c_1y) \\ &\quad + g_2 \times (a_2 + b_2x + c_2y) \\ &\quad + g_3 \times (a_3 + b_3x + c_3y) \end{aligned}$$

其中， $a_i + b_ix + c_iy$ 是一阶多项式基函数， a_i ， b_i ， c_i 是常数，拆开括号并合并后得：

$$g(x,y,t_0) = (g_1a_1 + g_2a_2 + g_3a_3) + (g_1b_1 + g_2b_2 + g_3b_3)x + (g_1c_1 + g_2c_2 + g_3c_3)y$$

在这个三角元内分别对 x,y 求偏导，

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial x} = g_1b_1 + g_2b_2 + g_3b_3 \\ \frac{\partial g}{\partial y} = g_1c_1 + g_2c_2 + g_3c_3 \end{cases}$$

6. 将上述一阶偏导代入步骤 4，得

$$\begin{aligned} &\left[\frac{\partial g}{\partial t} + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)\right] \times V = \\ &D_F \times \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (g_{1i}b_{1i} + g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{1i}c_{1i} + g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \times L_i\} \end{aligned}$$

7. 对时间 t 的处理， 计算 $(n+1)\Delta t$ 时近似估计值

$$\begin{aligned} & \left[\frac{g_{n+1} - g_n}{\Delta t} + K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) \right] \times V = \\ & D_F \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{1i} b_{1i} + g_{2i} b_{2i} + g_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{1i} c_{1i} + g_{2i} c_{2i} + g_{3i} c_{3i})] \times L_i \} \end{aligned}$$

8. 计算 g_{n+1}

$$g_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_F \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{1i} b_{1i} + g_{2i} b_{2i} + g_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{1i} c_{1i} + g_{2i} c_{2i} + g_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V}{V} + g_n$$

针对误差的优化 1:

对于上面求 g_{n+1} 的方程中，要做类似的处理。为方便写方程，这里假设中心点控制的每个三角形中，第 1 个点为中心点。将第 1 个点移至左边。

$$g_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot g_{1i} b_{1i} + n_{iy} \times g_{1i} c_{1i}) \times L_i]}{V} = \Delta t \cdot \frac{D_F \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{2i} b_{2i} + g_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{2i} c_{2i} + g_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V}{V} + g_n$$

将 g_{1i} 替换为 g_{n+1} ，对于等式左边：

$$\begin{aligned} & g_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times g_{1i} b_{1i} + n_{iy} \times g_{1i} c_{1i}) \times L_i]}{V} \\ &= g_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times g_{n+1} \times b_{1i} + n_{iy} \times g_{n+1} \times c_{1i}) \times L_i]}{V} \\ &= g_{n+1} - \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot g_{n+1} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{1i} + n_{iy} \times c_{1i}) \times L_i]}{V} \\ &= g_{n+1} \times \left\{ 1 - \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \times b_{1i} + n_{iy} \times c_{1i}) \times L_i]}{V} \right\} \end{aligned}$$

代回到方程，化简：

$$g_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{2i} b_{2i} + g_{3i} b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{2i} c_{2i} + g_{3i} c_{3i})] \times L_i \} + \Delta t \cdot [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V + g_n \cdot V}{V - \Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \times L_i]}$$

对 Gn 方程最新的改动见 2.4 节。

2.3 新方程（入流边界处）

$$\begin{cases} \iint_V J_{RyR} dv = 0 \\ \iint_V J_{refill} dv = \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - f_j) \times L_j] \end{cases}$$

其中：

1. n_2 为当前点对应的三角形单元中的入流边界数目
2. L_j 为第 j 段入流边界长度
3. f_j 为入流边界三角形单元三个顶点的 f 的平均

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V + \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - f_j) \times L_j]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n$$

$$f_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V + \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - f_j) \times L_j]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n$$

$$g_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_F \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{1i}b_{1i} + g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{1i}c_{1i} + g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V}{V} + g_n$$

针对误差的优化 1：

对于 f_j 为入流边界三个端点的 f 的平均，设三个点为 f_{1j} 、 f_{2j} 和 f_{3j} ，三个点中哪一个点为中心点就把该点的 f 值换作 $f_{n+\frac{1}{2}}$ ，这里假设第 1 个点为中心点。

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n_2} \left[K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - f_j) \times L_j \right] &= \sum_{j=1}^{n_2} \left[K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{1j} + f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j \right] \\
&= \sum_{j=1}^{n_2} \left[K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{n+\frac{1}{2}} + f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j \right] \\
&= \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j] - \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times \frac{f_{n+\frac{1}{2}}}{3} \times L_j] \\
&= \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j] - f_{n+\frac{1}{2}} \cdot \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times \frac{1}{3} \times L_j]
\end{aligned}$$

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j] + f_n \times 2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} (K_{fSR} \cdot L_j)}$$

$$f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j] + f_n \cdot [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \cdot V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} (K_{fSR} \cdot L_j)}$$

$$g_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \times L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V + g_n \cdot V}{V - \Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}$$

注意：计算 f_{n+1} 时， f_{2i} 和 f_{3i} 要代入 $n + \frac{1}{2}$ 时刻的值。

针对误差的优化 2:

$$f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{[n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i\} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} [K_{fSR} \times ([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3}) \times L_j] + f_n \cdot [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \cdot V + \frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V - \frac{1}{2} \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{li} + n_{iy} \cdot c_{li}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} (K_{fSR} \cdot L_j)}$$

对 F_n 、 G_n 方程最新的改动见 2.4 节。

2.4 新方程（出流边界处）

$$\begin{cases} \iint_V J_{refill} dv = 0 \\ \iint_V J_{RyR} dv = \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - f_k) \times L_k] \end{cases}$$

其中：

1. n_3 为当前点对应的三角形单元中的出流边界数目
2. L_k 为第 k 段出流边界长度
3. f_k 为出流边界三角形单元三个顶点的 f 的平均

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V + \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - f_k) \times L_k]}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V} + f_n$$

$$f_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_{Ca} \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{1i}b_{1i} + f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{1i}c_{1i} + f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f \cdot (F - g)] \cdot V + \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - f_k) \times L_k]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V} + f_n$$

$$g_{n+1} = \Delta t \cdot \frac{D_F \times \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{1i}b_{1i} + g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{1i}c_{1i} + g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V}{V} + g_n$$

针对误差的优化 1：

对于 f_k 为出流边界三个端点的 f 的平均，设三个点为 f_{1k} 、 f_{2k} 和 f_{3k} ，三个点中哪一个点为中心点就把该点的 f 值换作 $f_{n+\frac{1}{2}}$ ，这里假设第 1 个点为中心点。

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - f_k) \times L_k] &= \sum_{k=1}^{n_3} \left[K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{1k} + f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k \right] \\ &= \sum_{k=1}^{n_3} \left[K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{n+\frac{1}{2}} + f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k \right] \\ &= \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k] - \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times \frac{f_{n+\frac{1}{2}}}{3} \times L_k] \\ &= \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k] - f_{n+\frac{1}{2}} \cdot \sum_{k=1}^{n_3} [K_{RyR} \times \frac{1}{3} \times L_k] \end{aligned}$$

$$f_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_1} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k] + f_n \times 2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V}{2 \times [1 + \frac{B \times K}{(K + f_n)^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_1} (K_{RyR} \cdot L_k)}$$

$$f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_1} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k] + f_n \cdot [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \cdot V}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V - \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_1} (K_{RyR} \cdot L_k)}$$

$$g_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + \Delta t \cdot [K_F^+ \cdot f \cdot (F - g) - K_F^- \cdot g] \cdot V + g_n \cdot V}{V - \Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \times L_i]}$$

注意：计算 f_{n+1} 时， f_{2i} 和 f_{3i} 要代入 $n + \frac{1}{2}$ 时刻的值。

针对误差的优化 2：

$$f_{n+1} = \frac{\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \times (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \times (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \times L_i \} + \Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V + \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_1} [K_{RyR} \times ([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3}) \times L_k] + f_n \cdot [1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \cdot V + \frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \times L_i]}{[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{n+\frac{1}{2}})^2}] \times V - \frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] + \frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_1} (K_{RyR} \cdot L_j)}$$

针对误差的优化 3：

在优化 2 的基础上，去掉中间求 $f_{n+\frac{1}{2}}$ 的方程，迭代计算 5 至 10 次计算每一步 f_n 的值。第一次迭代（p=0）， f_{2i} 、 f_{3i} 用 n 时刻的值， f_{2j} 、 f_{3j} 、 f_{2k} 、 f_{3k} 也用 n 时刻的值；后面每次迭代 p， f_{2i} 、 f_{3i} 用 n 时刻的值和上一次迭代（p-1）的值的平均值， f_{2j} 、 f_{3j} 、 f_{2k} 、 f_{3k} 用上一次迭代的值。

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4)}{(5) - (6)}$$

$$\Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \cdot (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \cdot (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \cdot L_i \} \quad (1)$$

$$\Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V \quad (2)$$

$$f_n \times \sum_{i=1}^m \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{ni})^2} \right] V_i \quad (3)$$

$$\frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \times L_i] \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^m \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{ni})^2} \right] V_i \quad (5)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] \quad (6)$$

f_{1i}, f_{2i}, f_{3i} 为第 i 个三角形单元的 1 号, 2 号, 3 号顶点 n 时刻的值, f_{ni} 为第 i 个三角形单元的三个顶点 n 时刻的平均值, 即 $\frac{f_{1i}+f_{2i}+f_{3i}}{3}$, V_i 第 i 三角形单元的面积。

入流出流相对于非边界时, 只是分子分母各多了一项, 如下所示:

入流:

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4) + (7)}{(5) - (6) + (8)}$$

$$\Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \left\{ K_{fSR} \times \left([Ca^{2+}]_{fSR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3} \right) \times L_j \right\} \quad (7)$$

$$\frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \{ K_{fSR} \cdot L_j \} \quad (8)$$

出流:

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4) + (9)}{(5) - (6) + (10)}$$

$$\Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_3} \left\{ K_{RyR} \times \left([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3} \right) \times L_k \right\} \quad (9)$$

$$\frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_3} \{ K_{RyR} \cdot L_k \} \quad (10)$$

未对 g_{n+1} 进行优化 2 改动, 在优化 1 的基础上进行迭代计算 5 至 10 次, 第一次迭代

($p=0$), 方程右边 g_{2i} 、 g_{3i} 用 n 时刻的值; 后面每次迭代 p , g_{2i} 、 g_{3i} 用 n 时刻的值和上一次迭代 ($p-1$) 的值的平均值。

针对误差的优化 4:

F_n 公式保持 2.4 优化 3 不变；对 G_n 的公式改动如下（标红的地方是新改动或新增加的项）：

$$g_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4)}{(5) - (6)}$$

$$\Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \cdot (g_{2i}b_{2i} + g_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \cdot (g_{2i}c_{2i} + g_{3i}c_{3i})] \cdot L_i \} \quad (1)$$

$$\Delta t \cdot [K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g_n) - K_F^- \cdot g_n] \cdot V \quad (2)$$

$$g_n \cdot V \quad (3)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot g_n \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] \quad (4)$$

$$V \quad (5)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_F \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] \quad (6)$$

g_{n+1} 还是迭代，采用和 f_{n+1} 类似的方式。但注意 g_{2i} 和 g_{3i} 用每次新结果和 n 步的平均，绿色的都用 n 步的值。

对边界要特殊处理：上面只要涉及到 \sum 求和的项，从 $i = 1$ 到 m 个三角形中，如果某个三角形的 g_{2i} 和 g_{3i} 对应的点都是边界点（边界点包括入流、出流、壁面边界，也就是 $npoch(2i)$ 、 $npoch(3i)$ 都大于 0），那么在上面三个 \sum 求和的式子，都跳过这个三角形。

针对误差的优化 5:

(1) J_{dye} 项中 K_F^+ 由原来的 1000 改为 48800， K_F^- 由原来的 400 改为 19520

(2) G_n 的公式保持优化 4 不变，对 F_n 公式做类似优化 4 的改动（标红的地方是改动项）：

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4)}{(5) - (6)}$$

$$\Delta t \cdot D_{ca} \cdot \sum_{i=1}^m \{ [n_{ix} \cdot (f_{2i}b_{2i} + f_{3i}b_{3i}) + n_{iy} \cdot (f_{2i}c_{2i} + f_{3i}c_{3i})] \cdot L_i \} \quad (1)$$

$$\Delta t \cdot [K_F^- \cdot g - K_F^+ \cdot f_n \cdot (F - g)] \cdot V \quad (2)$$

$$f_n \times \sum_{i=1}^m \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{ni})^2} \right] V_i \quad (3)$$

$$\frac{f_n}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \times L_i] \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^m \left[1 + \frac{B \times K}{(K + f_{ni})^2} \right] V_i \quad (5)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot D_{Ca} \cdot \sum_{i=1}^m [(n_{ix} \cdot b_{1i} + n_{iy} \cdot c_{1i}) \cdot L_i] \quad (6)$$

入流:

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4) + (7)}{(5) - (6) + (8)}$$

$$\Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \left\{ K_{fsR} \times \left([Ca^{2+}]_{fsR} - \frac{f_{2j} + f_{3j}}{3} \right) \times L_j \right\} \quad (7)$$

$$\frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \{ K_{fsR} \cdot L_j \} \quad (8)$$

出流:

$$f_{n+1} = \frac{(1) + (2) + (3) + (4) + (9)}{(5) - (6) + (10)}$$

$$\Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_3} \left\{ K_{RyR} \times \left([Ca^{2+}]_{cyto} - \frac{f_{2k} + f_{3k}}{3} \right) \times L_k \right\} \quad (9)$$

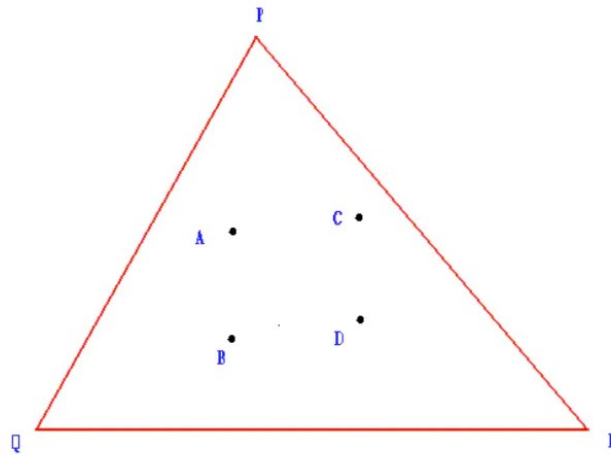
$$\frac{1}{3} \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{n_3} \{ K_{RyR} \cdot L_k \} \quad (10)$$

对边界的特殊处理：上面(1)、(4)、(6)项关于 \sum 求和的项，从 $i = 1$ 到 m 个三角形中，如果某个三角形的 f_{2i} 和 f_{3i} 对应的点都是边界点（边界点包括入流、出流、壁面边界，也就是 $npoch(2i)$ 、 $npoch(3i)$ 都大于0），那么在这三个 \sum 求和的式子，都跳过这个三角形。

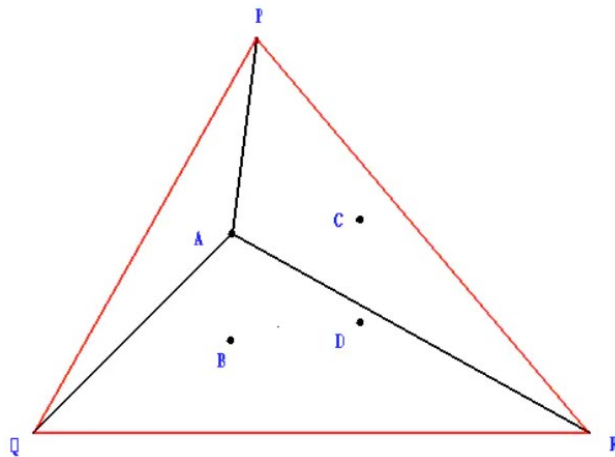
附录 1：举例在二维空间中使用 Bowyer 算法进行 Delaunay 三角化

Delaunay 三角化的优秀特性是空圆特性和最大化最小角特性。现在给定了平面上的一个点集 V ，求出它的 Delaunay 三角化。

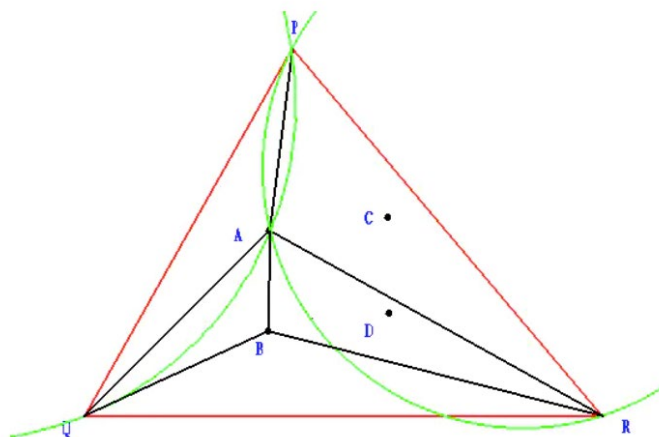
以四个点 A 、 B 、 C 、 D 举例，首先建立一个超级三角形 PQR ，这个三角形要把所有点都包含进去。



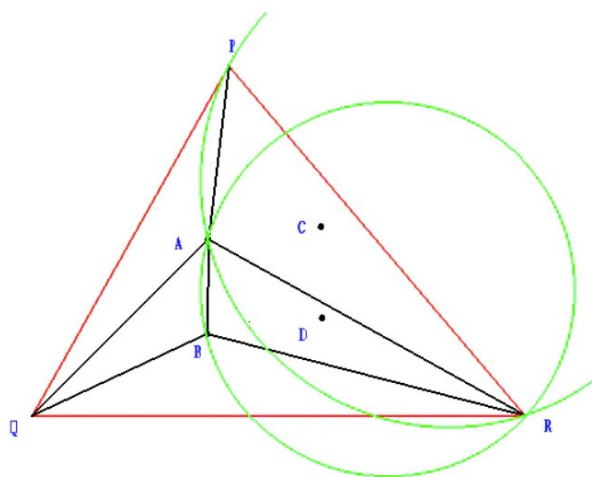
接着分析 A 点，因为 A 点在三角形 PQR 的外接圆内部，所以利用 A 点将三角形 PQR 拆成三个子三角形。



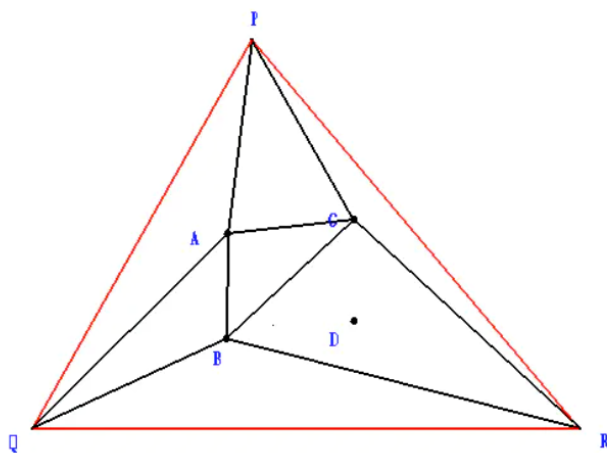
再考虑 B 点，它只在三角形 AQR 的内部，再将三角形 AQR 拆成三个子三角形。



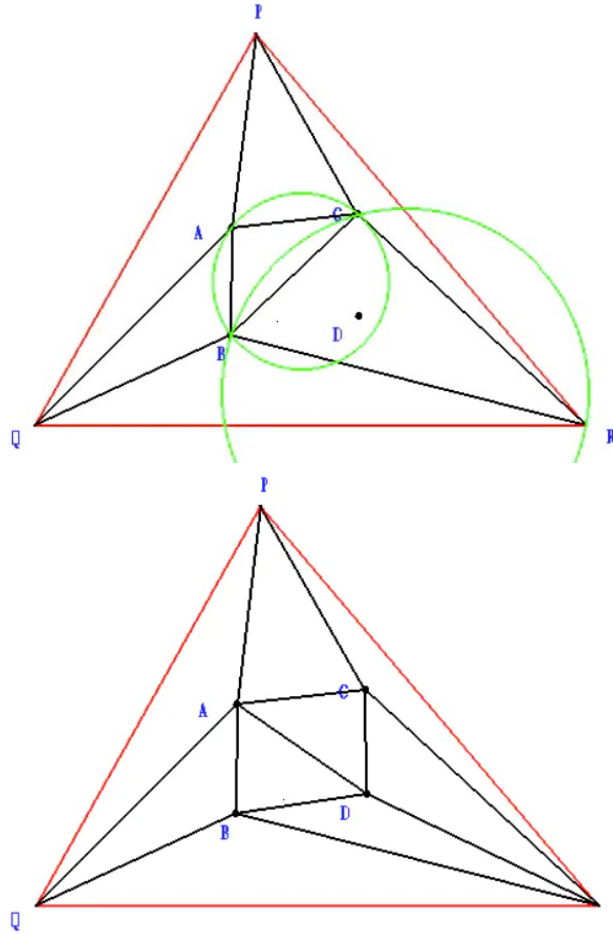
接着是 C 点，这时有 5 个三角形，对这 5 个三角形每一个检查 C 点在不在它的外接圆内。经过检测，发现它在三角形 APR 和三角形 ABR 的外接圆内。



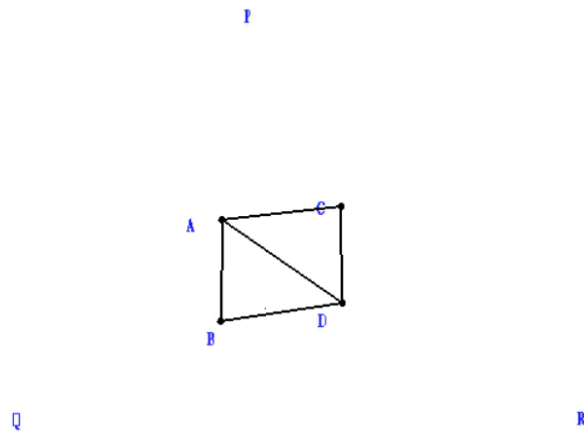
删除三角形 APR 和三角形 ABR 的公共边 AR，得到四边形 ABPR，并将 C 点与每一个边组成一个三角形。



最后对 D 点进行分析，它在三角形 ABC 和三角形 BCR 的外接圆内，所以应删除公共边 BC，再用 D 点与这两个三角形的其他边形成子三角形。



最后把含超级三角形顶点的三角形全部删除，就得到这四个点的三角化。

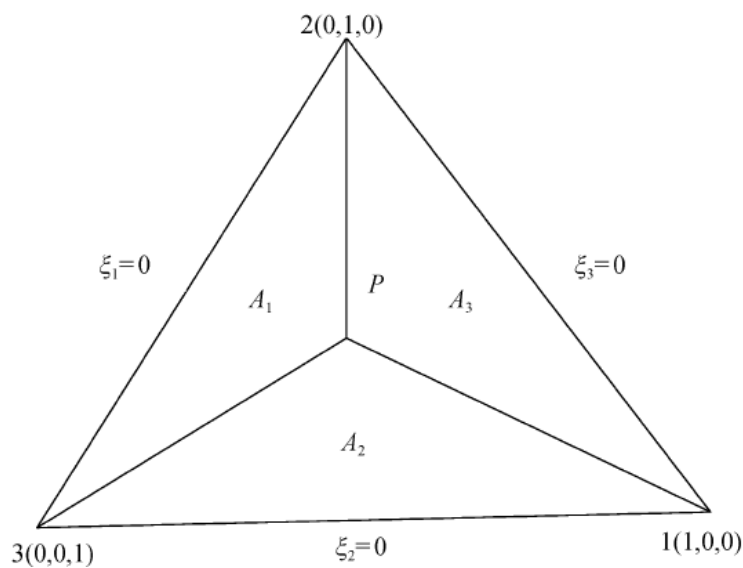


附录 2： 将 f 在空间的分布转变为基函数近似，式中 a, b, c 常数的推导

1. 三角形面积 A 可以简单的用一个三阶行列式表示。

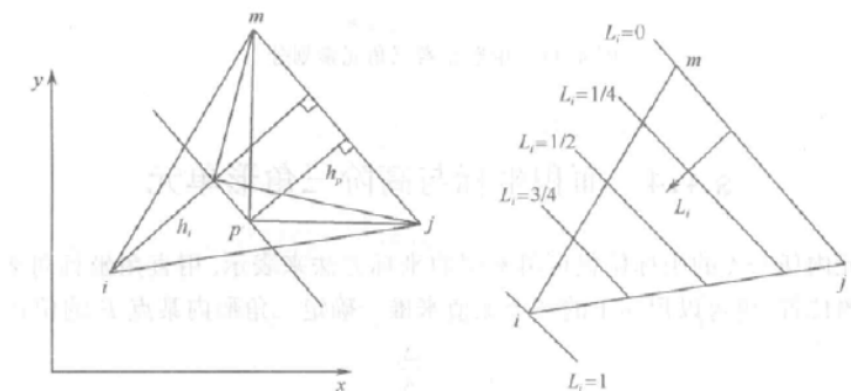
$$A = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix}, \text{ 令 } D = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix}, \text{ 那么 } D = 2A$$

2. 引入面积坐标， $\xi_i = \frac{A_i}{A}$ ， $i = (1, 2, 3)$ ， A 是三角形单元的面积， A_i 的意义见下图。



因为 $A_1 + A_2 + A_3 = A$ ，所以 $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1$ ，故三个面积坐标中，只有两个是独立的。

3. 举例三角形 Pjm 的面积也就是 A_i 为：



$$A_i = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix} = \frac{1}{2} [(x_j y_m - x_m y_j) + (y_j - y_m)x + (x_m - x_j)y]$$

上式两边同时除以 A ，得：

$$\begin{aligned} \xi_i &= \frac{1}{2A} [(x_j y_m - x_m y_j) + (y_j - y_m)x + (x_m - x_j)y] \\ &= \frac{1}{D} [(x_j y_m - x_m y_j) + (y_j - y_m)x + (x_m - x_j)y] \\ &= \frac{1}{D} (x_j y_m - x_m y_j) + \frac{1}{D} (y_j - y_m)x + \frac{1}{D} (x_m - x_j)y \end{aligned}$$

$$\text{令} \begin{cases} a_i = \frac{1}{D} (x_j y_m - x_m y_j) \\ b_i = \frac{1}{D} (y_j - y_m) \\ c_i = \frac{1}{D} (x_m - x_j) \end{cases},$$

因为 j, m 点坐标已知，三角形单元面积已知，即 a_i ， b_i ， c_i 是常数