doi：10.13413/j.cnki.jdxblxb.2024215

一类含时 Poisson-Nernst-Planck 方程的时间自适应计算

韦 鹏，沈瑞刚

（桂林电子科技大学 数学与计算科学学院，广西应用数学中心，
广西高校数据分析与计算重点实验室，广西 桂林 541004）

摘要： 基于相邻时间步的时间自适应有限元方法求解一类含时 Poisson-Nernst-Planck（PNP）方程，以加速求解含有多种离子的二维 PNP 方程的长时间数值模拟效率. 数值实验结果表明，该方法在两种数值格式下都可以有效加速计算，对于长时间 PNP 方程的数值计算有效.

关键词： Poisson-Nernst-Planck 方程；有限元方法；时间自适应；数值计算

中图分类号： O241.82 **文献标志码：** A **文章编号：** 1671-5489(2024)06-1352-07

Time-Adaptive Computation for a Class of Time-Dependent Poisson-Nernst-Planck Equations

WEI Peng, SHEN Ruigang

(*Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Data Analysis and Computation*,
Guangxi Mathematics Applied Center (GUET),
School of Mathematics and Computing Science, *Guilin University of Electronic Technology*,
Guilin 541004, *Guangxi Zhuang Autonomous Region*, *China*)

Abstract: The time-adaptive finite element method based on adjacent time steps was used to solve a class of time-dependent Poisson-Nernst-Planck (PNP) equations, which accelerated the efficiency of long-term numerical simulations for solving two-dimensional PNP equations containing multiple ions. Numerical experimental results show that the method can effectively accelerate computations in both numerical formats and is effective for long-term numerical computation of PNP equations.

Keywords: Poisson-Nernst-Planck equation; finite element method; time-adaptive; numerical computation

Poisson-Nernst-Planck(PNP)方程是一类用来描述静电扩散反应过程和带电粒子传输强耦合的偏微分方程组. PNP 方程在生物化学领域[1]应用广泛，在半导体器件[2-3]、生物离子通道[4-5]和电化学系统[6-8]等领域也具有重要作用. 由于强耦合非线性因素的制约，一般情况下很难获得该方程的解析解，为求该方程的近似解，目前已提出了许多数值方法，如有限体积法[9]、有限差分法[10]、有限元法[11]和虚单元法[12]等. 有限差分法因其形式简单、编程易实现，因而在一些简单模型的求解中得到广泛应

收稿日期： 2024-05-21.

第一作者简介： 韦 鹏(2000—)，男，壮族，硕士研究生，从偏微分方程数值解的研究，E-mail：nlpeng@qq.com. **通信作者简介：** 沈瑞刚(1989—)，男，汉族，博士，副教授，从事偏微分方程数值方法及应用的研究，E-mail：rgshen@guet.edu.cn.

基金项目： 国家自然科学基金(批准号：12101595；12161026)、广西科技基地和人才专项基金(批准号：桂科 AD23026048).

用[13]，但对于复杂的大分子生物系统，如细胞膜、离子通道等复杂问题，有限元法具有较好的边界适应性和网格灵敏度，在生物大分子模拟研究中得到广泛关注[14].

由于含时 PNP 方程随着时间演化在某一时间段通常会出现数值解的剧烈变化，因此，为观察并刻画这一阶段的物理扩散过程，通常需要较小的时间步长和精细的数值计算. 针对上述问题，Fu 等[15]提出了一种新的高阶时空有限元格式，并使用经典的 PI 步长控制算法指导 PNP 方程时间步变化；Yan 等[16]提出了一种半隐式(VSSBDF)的时间离散格式，并设计基于两个时间步长下控制算法指导步长变化. 尽管这些方法都取得了很好的效果，但没有同时考虑时间离散格式和相邻时间层之间的影响，因此这些方法还可以进一步优化. 本文针对一类含时 PNP 方程，空间上采取有限元离散格式，时间上采用向后 Euler 格式和向后微分格式，设计一种基于相邻时间层的时间自适应算法，进行有限元计算. 数值实验结果表明，该方法对于含时 PNP 方程长时间演化模拟有效.

1　预备知识

设 Ω 是 $\mathbb{R}^2$ 中的有界多边形区域，$\partial\Omega$ 是 Ω 的 Lipchitz 连续边界. 使用标准的 Sobolev 空间记号 $W^{s,p}(\Omega)$. 特别地，当 $S=2$ 时，可记 $H^2(\Omega)=W^{2,p}(\Omega)$，其中，$\|\cdot\|_{m,\Omega}$和$|\cdot|_{m,\Omega}$分别表示相应的范数和半范数，$(\cdot,\cdot)_\Omega$ 表示标准L^2 内积. 假设 $T_h(\Omega)$为三角形单元 τ 的并，且是大小为 h 形状正则的网格. 令 $h=\max\limits_{\tau\in T_h} h_\tau$，其中 h_τ 表示单元 τ 的直径. 定义线性有限元空间

$$S^h(\Omega)=\{v\in H^1(\Omega):\ v|_\tau\in P^1(\tau),\ \forall\tau\in T_h(\Omega)\},$$

$$S_0^h(\Omega)=S^h(\Omega)\cap H_0^1(\Omega),$$

其中 $P^1(\tau)$为 τ 上的线性多项式集合.

考虑如下的含时 PNP 模型：

$$\begin{cases} p_t^i-\nabla\cdot(\nabla p^i+q^ip^i\nabla\varphi)=F_i, & \text{在 }\Omega\text{ 上},\quad t\in(0,T),\quad i=1,2,\\ -\nabla\cdot(\nabla\varphi)=\sum\limits_{i=1}^{2}q^ip^i+F_3, & \text{在 }\Omega\text{ 上},\quad t\in(0,T),\\ p^i(0)=p^{i,0},\quad \varphi(0)=\varphi^0,\quad F_i(0)=F_i^0, & \text{在 }\Omega\text{ 上},\end{cases}\tag{1}$$

及齐次 Dirichlet 边界条件

$$\begin{cases}\varphi=0, & \text{在 }\partial\Omega\text{ 上},\quad t\in(0,T),\\ p^i=0, & \text{在 }\partial\Omega\text{ 上},\quad t\in(0,T),\end{cases}\tag{2}$$

其中：p^i 是第 i 种离子的浓度；φ 表示静电势；q^i表示第 i 种离子的电荷量；F_i 为反应源项；$p^{i,0}$，φ^0，$F_i{}^0$ 表示初始值.

方程组(1)-(2)的变分形式为：求 $p^i\subset H_0^1(\Omega)(i=1,2)$和 $\varphi\subset H_0^1(\Omega)$，使得

$$\left(\frac{\partial p^i}{\partial t},v\right)+(\nabla p^i,\nabla v)+(q^ip^i\nabla\varphi,\nabla v)=(F_i,v),\quad\forall v\in H_0^1(\Omega),\tag{3}$$

$$(\nabla\varphi,\nabla w)=\sum_{i=1}^{2}q^i(p^i,w)+(F_3,w),\quad\forall w\in H_0^1(\Omega).\tag{4}$$

2　PNP 方程全离散格式

2.1　有限元离散格式

假设方程组(3)-(4)存在唯一解(φ^0,p^1,p^2)，则可给出方程组(3)-(4)的半离散格式：求$(\varphi_h,p_h^1,p_h^2)\in[S_0^h(\Omega)]^3$ 满足：

$$\left(\frac{\partial p_h^i}{\partial t},v_h\right)+(\nabla p_h^i,\nabla v_h)+(q^ip_h^i\nabla\varphi_h,\nabla v_h)=(F_i,v_h),\quad\forall v_h\in S_0^h(\Omega),\quad i=1,2,\tag{5}$$

$$(\nabla\varphi_h,\nabla w_h)=\sum_{i=1}^{2}q^i(p_h^i,w_h)+(F_3,w_h),\quad\forall w_h\in S_0^h(\Omega).\tag{6}$$

为给出方程组(5)的全离散格式，需要对时间区间$[0,T]$进行划分，划分为 N 个区间，分点为

$0=S^0<S^1<\cdots<S^n=T$. 每个时间层的时间步长为 t^n, 且 $S^n=S^{n-1}+t^{n-1}=S^0+t^1+t^2+\cdots+t^{n-1}$. 于是有方程组(5)-(6)的全离散向后微分格式为: 给定 $(\varphi_h^{n-2},p_h^{1,n-2},p_h^{2,n-2})\in[S_0^h(\Omega)]^3$ 和 $(\varphi_h^{n-1},p_h^{1,n-1},p_h^{2,n-1})\in[S_0^h(\Omega)]^3$, 求 $(\varphi_h^n,p_h^{1,n},p_h^{2,n})\in[S_0^h(\Omega)]^3$ 满足:

$$\left(\frac{3p_h^{i,n}-4p_h^{i,n-1}+p_h^{i,n-2}}{2t^n},v_h\right)+(\nabla p_h^{i,n},\nabla v_h)+(p_h^{i,n}\nabla\varphi_h^n,\nabla v_h)=(F_i,v_h),\quad v_h\in S_0^h(\Omega),\tag{7}$$

$$(\nabla\varphi_h^n,\nabla w_h)=\sum_{i=1}^{2}d(p_h^{i,n},w_h)+(F_3,w_h),\quad \forall\, w_h\in S_0^h(\Omega),\tag{8}$$

其中 $i=1,2$. 将式(7)-(8)变形可得

$$\begin{cases}(3p_h^{i,n},v_h)+2t^n(\nabla p_h^{i,n}+q^ip_h^{i,n}\nabla\varphi_h^n,\nabla v_h)=2t^n(F_i,v_h)+(4p_h^{i,n-1}-p_h^{i,n-2},v_h),\quad \forall\, v_h\in S_0^h(\Omega),\\ (\nabla\varphi_h^n,\nabla w_h)=\sum\limits_{i=1}^{2}q^j(p_h^{i,n},w_h)+(F_3,w_h),\quad \forall\, w_h\in S_0^h(\Omega).\end{cases}$$

求解方程组(7)-(8)得到的解$(\varphi_h^n,p_h^{1,n},p_h^{2,n})$称为全离散向后微分格式下的有限元解.

同理, 对于方程组(5)-(6)的全离散向后 Euler 格式为: 给定$(\varphi_h^{n-1},p_h^{1,n-1},p_h^{2,n-1})\in[S_0^h(\Omega)]^3$, 求$(\varphi_h^n,p_h^{1,n},p_h^{2,n})\in[S_0^h(\Omega)]^3$ 满足:

$$\left(\frac{p_h^{i,n}-p_h^{i,n-1}}{t^n},v_h\right)+(\nabla p_h^{i,n},\nabla v_h)+(q^ip_h^{i,n}\nabla\varphi_h^n,\nabla v_h)=(F_i,v_h),\quad \forall\, v_h\in S_0^h(\Omega),\tag{9}$$

$$(\nabla\varphi_h^n,\nabla w_h)=\sum_{i=1}^{2}q^i(p_h^{i,n},w_h)+(F_3,w_h),\quad \forall\, w_h\in S_0^h(\Omega),\tag{10}$$

其中 $i=1,2$. 将式(9)-(10)变形可得

$$\begin{cases}(p_h^{i,n},v_h)+t^n(\nabla p_h^{i,n}+q^ip_h^{i,n}\nabla\varphi_h^n,\nabla v_h)=t^n(F_i,v_h)+(p_h^{i,n-1},v_h),\quad \forall\, v_h\in S_0^h(\Omega),\\ (\nabla\varphi_h^n,\nabla w_h)=\sum\limits_{i=1}^{2}q^i(p_h^{i,n},w_h)+(F_3,w_h),\quad \forall\, w_h\in S_0^h(\Omega).\end{cases}$$

求解方程组(9)-(10)得到的解$(\varphi_h^n,p_h^{1,n},p_h^{2,n})$称为全离散向后 Euler 格式下的有限元解.

文献[17]给出了方程组(9)-(10)在二维线性有限元解的误差估计结果.

引理 1[17] 设$(\varphi^n,p^{i,n})$和$(\varphi_h^n,p_h^{i,n})$($i=1,2$)分别是方程组(5)-(6)和方程组(9)-(10)的解. 则存在两个不依赖于网格剖分 h 的常数 τ_0 和 h_0, 使得对于 $n=0,1,\cdots,N$, 有

$$\max_{0\leqslant n\leqslant N}\Big(\|\varphi^n-\varphi_h^n\|+\sum_{i=1}^{2}\|p^{i,n}-p_h^{i,n}\|\Big)\leqslant C(t+h^2),$$

其中 $t\leqslant\tau_0$, $h\leqslant h_0$.

2.2 自适应时间步算法

为解决方程组(9)-(10)的强耦合性和非线性, 目前常用的方法是 Gummel 迭代法[18]和两网格方法[17,19], 由于两网格方法对算法实现和调试方面比单网格方法复杂, 因此本文采用相对简单的带有 Gummel 迭代的有限元算法.

算法 1 Gummel 有限元算法.

输入: 迭代的初值$(\phi_h^0,p_h^{1,0},p_h^{2,0})$, 时间层时间 n 及其步长 t^n, 容错误差 $\delta=10^{-6}$;

输出: $(\phi^T,p^{1,T},p^{2,T})$;

步骤 1) 初始化非线性迭代: 当 $n\geqslant0$, 且 $l=0$ 时, $(\phi_h^n,p_h^{1,n},p_h^{2,n})=(\phi_h^{n+t,0},p_h^{n+t,1,0},p_h^{n+t,2,0})$;

步骤 2) 在每个时间层上进行有限元计算: 当$(\varphi_h^{n+t,l},p_h^{1,n+t,l},p_h^{2,n+t,l})\in[S_0^h(\Omega)]^3$ 时, 对 $l\geqslant0$ 且 $\forall\, v_h,w_h\in S_0^h(\Omega)$, 有

$$(p_h^{1,n+t^n,l+1},v_h)+t^n(\nabla p_h^{1,n+t^n,l+1}+q^1p_h^{1,n+t^n,l+1}\nabla\varphi_h^{n+t^n,l},\nabla v_h)=t^n(F_1,v_h)+(p_h^{1,n},v_h),$$

$$(p_h^{2,n+t^n,l+1},v_h)+t^n(\nabla p_h^{2,n+t^n,l+1}+q^1p_h^{2,n+t^n,l+1}\nabla\varphi_h^{n+t^n,l},\nabla v_h)=t^n(F_2,v_h)+(p_h^{2,n},v_h),$$

$$(\nabla\varphi_h^{n+t^n,l+1},\nabla w_h)=(q^1p_h^{1,n+t^n,l+1}+q^2p_h^{2,n+t^n,l+1},w_h)+(F_3,w_h)\ ;$$

步骤 3) 中止非线性迭代: 对给定的容错误差 δ, 当

$$\|\varphi_h^{n+t^n,l+1}-\varphi_h^{n+t^n,l}\|\leqslant\delta$$

时即停止迭代，此时令

$$(\phi^{n+t^n},p^{1,n+t^n},p^{2,n+t^n})=(\phi^{n+t^n,l+1},p^{1,n+t^n,l+1},p^{2,n+t^n,l+1}),$$

否则，令 $l=l+1$，返回步骤 2)继续迭代；

步骤 4) 终止循环：当 $n+t^n=T$ 时停止循环，否则，令 $n=n+t^n$，返回步骤 1).

由于一致时间剖分下 PNP 方程的数值效率较低，且随着长时间演化，误差累积的现象急剧增强，给长时间离子通道问题的模拟研究带来了较大困难. 自适应时间步算法能提升数值模拟的效率，特别是在处理含时方程时. 目前，PNP 方程的自适应时间步算法有经典的 PI 控制算法[15]和双时间步长算法[16]等. 这些算法的主要思想是根据不同的准则调整时间步长，通常用户需指定最大(为准确性)和最小时间步长(为效率性)以及容许误差. 基于这些数值方法，本文提出一种基于相邻时间层的时间自适应算法，以优化时间步长并加快模拟速度.

算法 2　自适应时间步算法.

输入：$(\phi^{n-1},p^{1,n-1},p^{2,n-1},t^n)$；

输出：t^{n+1}；

步骤 1) 求有限元解：在给定的网格上计算电势和浓度的有限元解$(\phi^n,p^{1,n},p^{2,n})$；

步骤 2) 计算单个自适应指示值：$e^{i,n}=\dfrac{\|p^{i,n}-p^{i,n-1}\|}{\|p^{i,n}\|}$；

步骤 3) 计算总的自适应指示值：$e^n=\max\{e^{1,n},e^{2,n}\}$.

if $e^n>\mathrm{tol}$ then

更新 $t^{n+1}=\left(\dfrac{\mathrm{tol}}{e^n}\right)^{0.5}t^n$；

else

更新 $t^{n+1}=\min\left\{\max\left\{\left(\dfrac{\mathrm{tol}}{e^n}\right)^{0.5}t^n,t_{\min}\right\},t_{\max}\right\}$.

end if

算法 2 给出了自适应时间步长的算法，该算法以最大时间步长 $t_{\max}$、最小时间步长 $t_{\min}$和容限误差 tol 为参数来调整自适应水平.

3　数值实验

下面给出数值实例验证向后微分和向后 Euler 数值格式的正确性，并验证所提出时间自适应方法的有效性. 实验环境为桂林电子科技大学超算平台(Linux)，内存为 3.58 TB，采用 Fortran90 语言编写计算程序，所有计算结果均来自同一平台. 在数值实验中，比较了时间自适应方法和一致时间步方法的迭代步数(用 IT 表示，单位为次)和迭代时间(用 t_{CPU}表示，单位为 s).

下面以二维为例，求解的对象为方程组(1)-(2)组成的 PNP 方程组，求解区域为 $\Omega=[0,1]\times[0,1]$，取 $q^1=1$，$q^2=-1$，$T=0.5$，右端函数依赖于解析解，其中解析解定义为

$$\begin{cases}\varphi=(1-\exp\{-t\})\sin(\pi x)\sin(\pi y),\\ p^1=\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin(t),\\ p^2=\sin(3\pi x)\sin(3\pi y)\sin(2t).\end{cases}\tag{11}$$

定义 L^2 范数为

$$u_{L^2}=\sqrt{\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h\|_2^2},$$

其中，$\boldsymbol{u}$ 表示式(11)中 p^1,p^2,φ 的精确解，$\boldsymbol{u}_h$ 是有限元解. 选取如下收敛阶计算公式：

$$\mathrm{order}=\frac{\log(u_{L^2,i+1}/u_{L^2,i})}{\log(h_{i+1}/h_i)},\qquad i=1,2,\cdots.$$

为验证向后 Euler 和向后微分数值格式的有效性及数值结果的正确可靠性，选取不同空间步长 h，$T=0.5$，时间步长 $t^1=t^2=\cdots=t^n=h^2$，初值$(\varphi_h^0,p_h^{1,0},p_h^{2,0})=(0,0,0)$进行测试.

表 1 列出了 p^1 在 L^2 范数下的误差. 由表 1 可见，在 L^2 范数下有限元解和精确解的误差收敛阶接

近2阶，表明两种格式下有限元方法的数值结果收敛阶与定理1理论结果一致，因此可以继续进行长时间的数值模拟. 于是，选择 $t_{\max}=0.1$，$t_{\min}=0.000\ 1$ 和 $\mathrm{tol}=0.01$ 作为自适应时间步算法的参数，对上述给出两种数值格式下的PNP方程组(7)-(10)进行计算.

表1 p^1 在 L^2 范数下的误差

Table 1 Error of p^1 under L^2 norm

h	微分 $p^1_{L^2}$	微分收敛阶	Euler $p^1_{L^2}$	Euler收敛阶
1/4	0.130 557		0.130 562	
1/8	4.10×10^{-2}	1.67	4.10×10^{-2}	1.67
1/16	1.09×10^{-2}	1.91	1.09×10^{-2}	1.91
1/32	2.77×10^{-3}	1.98	2.77×10^{-3}	1.98
1/64	6.95×10^{-4}	1.99	6.95×10^{-4}	1.99

表2列出了自适应算法和恒定步长算法的实验结果. 表2结果表明，在固定空间步长 $h=1/64$，初始时间步长 $t^1=0.001$，并采用两种不同的格式时，使用自适应步长算法比恒定步长需要更少的时间和迭代次数，从而有效减少了大规模计算的迭代次数和计算成本，从 t_{CPU} 和IT的角度出发向后微分数值格式比向后Euler格式迭代次数少，说明自适应算法对于向后微分格式效果更好. 此外，两种格式都避免了额外的计算开销而导致的计算时间过长问题.

表2 自适应算法和恒定步长算法的实验结果

Table 2 Experimental results of adaptive algorithm and constant step size algorithm

格式	算法	$T=1$		$T=2$		$T=3$	
		IT/次	t_{CPU}/s	IT/次	t_{CPU}/s	IT/次	t_{CPU}/s
向后Euler	一致步长	1 000	300.9	2 000	500.9	5 000	1 135.6
	自适应	544	123.6	584	146.2	1 142	344.8
向后微分	一致步长	1 000	191.48	2 000	486.8	5 000	1 153.2
	自适应	452	101.3	480	118.5	1 142	281.5

图1为两种格式下浓度 p^2 的数值误差对比结果. 由图1可见，在两种格式下自适应算法和一致步长算法对于 p^2 的 L^2 误差最大的差距是 3.1×10^{-4}，虽然微分格式在 L^2 范数下的误差波动情况比Euler格式下大，但微分格式出现了比一致步长算法误差还小的情况，因此这是在可接受范围内的. 此外，两种格式都避免了算法过度调整而导致的不稳定性.

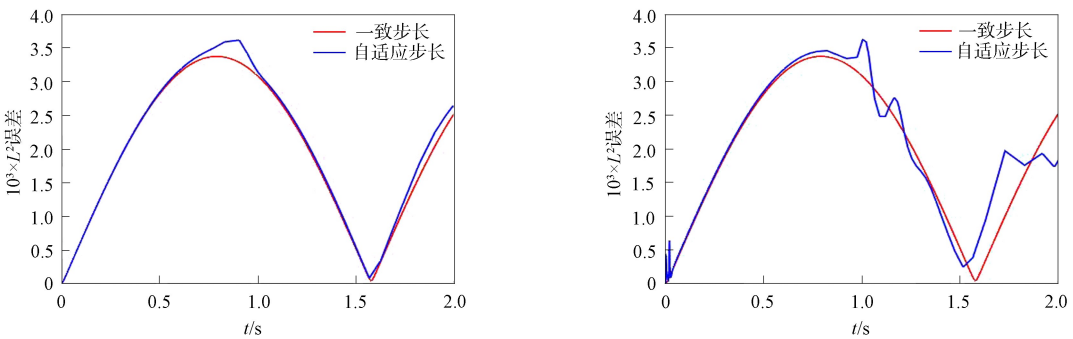


图1 两种格式下浓度 p^2 的数值误差对比结果

Fig. 1 Comparison results of numerical errors of concentration p^2 in two formats

图2为两种格式下电势 φ 的数值误差对比结果. 由图2可见，对于电势 φ 的 L^2 误差，两种格式下自适应算法和一致步长算法下的结果不存在差别，说明自适应算法对于两种数值格式下的PNP方程有效.

图3为两种格式下的时间层步长对比结果. 由图3可见，两种格式在每个时间层的时间步变换是在最大最小时间步长的限制下，同时当解趋近于稳定时，时间步长开始变粗，趋近最大时间步长，当解开始震荡时，时间步长开始变细. 但微分格式下的时间步长变换比Euler格式下的更快，表明自适

应时间步算法对于向后微分格式更精确.

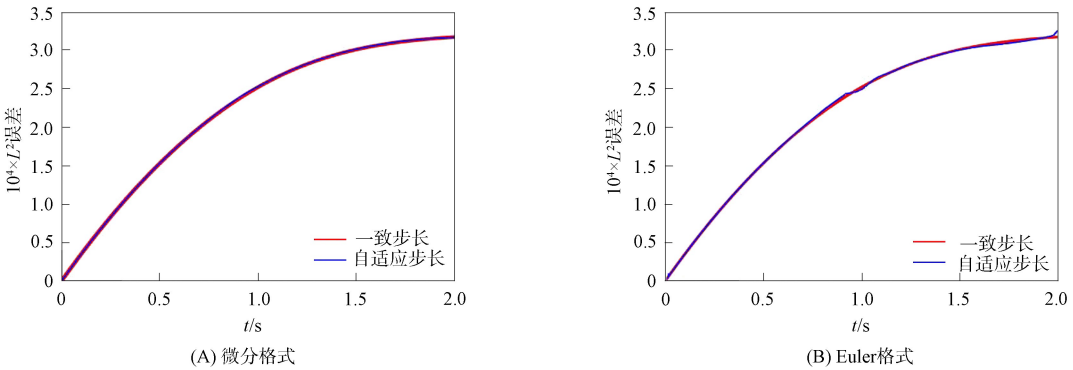


图 2　两种格式下电势 φ 的数值误差对比结果

Fig. 2　Comparison results of numerical errors of electrostatic potential φ in two formats

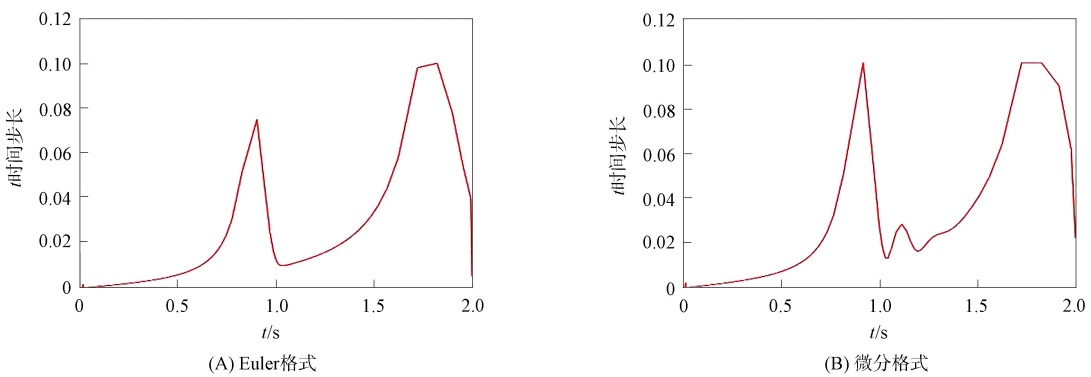


图 3　两种格式下的时间层步长对比结果

Fig. 3　Comparison results of step size of time layer in two formats

综上所述，本文给出了一种求解含时 PNP 方程的时间自适应算法，对一类带真解的含时 PNP 方程进行了数值实验，数值实验结果表明了时间自适应方法的有效性. 该方法可进一步推广到更复杂的 PNP 模型中.

参　考　文　献

[1] 彭波，李翰林，卢本卓. 生物分子模拟中的静电计算 [J]. 计算物理，2015，32(2)：127-159. (PENG B，LI H L，LU B Z. Electrostatic Calculation in Biomolecular Modeling [J]. Chinese Journal Computational Physics，2015，32(2)：127-159.)

[2] VAN ROOSBROECK W. Theory of the Flow of Electrons and Holes in Germanium and Other Semiconductors [J]. The Bell System Technical Journal，1950，29(4)：560-607.

[3] JEROME J W. Analysis of Charge Transport：A Mathematical Study of Semiconductor Devices [M]. New York：Springer-Verlag，1996：1-167.

[4] SINGER A，NORBURY J. A Poisson-Nernst-Planck Model for Biological Ion Channels—An Asymptotic Analysis in a Three-Dimensional Narrow Funnel [J]. SIAM Journal on Applied Mathematics，2009，70(3)：949-968.

[5] EISENBERG B. Ionic Channels in Biological Membranes-Electrostatic Analysis of a Natural Nanotube [J]. Contemporary Physics，1998，39(6)：447-466.

[6] VAN SOESTBERGEN M，BIESHEUVEL P M，BAZANT M Z. Diffuse-Charge Effects on the Transient Response of Electrochemical Cells [J]. Physical Review E，2010，81(2)：021503-1-021503-13.

[7] RICHARDSON G，KING J R. Time-Dependent Modelling and Asymptotic Analysis of Electrochemical Cells [J]. Journal of Engineering Mathematics，2007，59(3)：239-275.

[8] MARCICKI J，CONLISK A T，RIZZONI G. Comparison of Limiting Descriptions of the Electrical Double Layer Using a Simplied Lithium-Ion Battery Model [J]. ECS Transactions，2012，41(14)：9-21.

[9] BANGK R E, COUGHRAN W M, Jr, COWSAR L C. The Finite Volume Scharfetter-Gummel Method for Steady Convection Diffusion Equations [J]. Computing and Visualization in Science, 1998, 1(3): 123-136.

[10] CÁRDENAS A E, COALSON R D, KURNIKOVA M G. Three-Dimensional Poisson-Nernst-Planck Theory Studies: Influence of Membrane Electrostatics on Gramicidin a Channel Conductance [J]. Biophysical Journal, 2000, 79(1): 80-93.

[11] LU B Z, HOLST M J, MCCAMMON J A, et al. Poisson-Nernst-Planck Equations for Simulating Biomolecular Diffusion-Reaction Processes Ⅰ: Finite Element Solutions [J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(19): 6979-6994.

[12] 丁聪, 刘杨, 阳莺, 等. 一种三维 Poisson-Nernst-Planck 方程的虚单元计算 [J]. 吉林大学学报(理学版), 2024, 62(2): 293-301. (DING C, LIU Y, YANG Y, et al. Virtual Element Computation for a Three-Dimensional Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. Journal of Jilin University (Science Edition), 2024, 62(2): 293-301.)

[13] JEROME J W, KERKHOVEN T. A Finite Element Approximation Theory for the Drift Diffusion Semiconductor Model [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1991, 28(2): 403-422.

[14] SONG Y H, ZHANG Y J, SHEN T Y, et al. Finite Element Solution of the Steady-State Smoluchowski Equation for Rate Constant Calculations [J]. Biophysical Journal, 2004, 86(4): 2017-2029.

[15] FU G S, XU Z L. High-Order Space-Time Finite Element Methods for the Poisson-Nernst-Planck Equations: Positivity and Unconditional Energy Stability [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2022, 395: 115031-1-115031-15.

[16] YAN D, PUGH M C, DAWSON F P. Adaptive Time-Stepping Schemes for the Solution of the Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. Applied Numerical Mathematics, 2021, 163: 254-269.

[17] SHEN R G, SHU S, YANG Y, et al. A Decoupling Two-Grid Method for the Time-Dependent Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. Numerical Algorithms, 2020, 83(4): 1613-1651.

[18] LU B Z, ZHOU Y C. Poisson-Nernst-Planck Equations for Simulating Biomolecular Diffusion-Reaction Processes Ⅱ: Size Effects on Ionic Distributions and Diffusion-Reaction Rates [J]. Biophysical Journal, 2011, 100(10): 2475-2485.

[19] 唐鸣, 阳莺, 李雪芳. 一类 Poisson-Nernst-Planck 方程的两网格有限元离散方法 [J]. 吉林大学学报(理学版), 2019, 57(3): 523-529. (TANG M, YANG Y, LI X F. Two-Grid Finite Element Discretization Methods for a Class of Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. Journal of Jilin University (Science Edition), 2019, 57(3): 523-529.)

(责任编辑: 李 琦)