分子构象变化的若干数值方法研究

靳聪明

摘　要

本文研究的是分子构象变化的小概率事件的数值方法与数值模拟. 小概率事件是生物分子、固体物理和计算化学中重要的问题, 而String方法和NEB (Nudged Elastic Band)方法是处理小概率事件的有效方法. 我们对零温度String方法和NEB方法及相应的差分格式进行了细致的数学分析(包括它们的稳定性、收敛性及计算量), 给出了两种方法的最优迭代步长的选取策略, 并对两种方法进行了比较. 本文并行计算了生物分子的构象变化并得到了满意的结果. 此外, 应用不变测度可以把分子的构象看作几乎不变子集进行研究. 我们因而还给出了Frobenius-Perron 算子不变测度的分片线性Markov 近似方法的后验误差估计与相应的计算.

关键词: 小概率事件, 转移路径, 转移速率, String方法, 构象变化, 分子动力学, NEB方法, 稳定性, 多肽链, 不变测度, 后验误差估计, Frobenius-Perron算子