间断Galerkin有限元方法应用及生物分子模拟中的方法研究

秦佩华

摘要

本文分为两部分：第一部分主要研究了间断Galerkin有限元方法(Discontinuous Galerkin, DG) 在特征值问题中的应用；第二部分主要研究了分子力学模拟中如 何构造模型才能够更快速高效的模拟分子系统，如蛋白质分子的模拟，提出三层 模型，并导出了半解析镜像电荷方法和最小二乘镜像电荷方法。

DG方法由于其易于并行、精度高等特点被广泛应用。本文将一类DG方法应用到椭圆型特征值问题中，并对非光滑区域，如区域有裂缝、区域含有凹角等问题，计算了Laplace特征值问题的特征值。通过比较DG方法和协调有限元、非协调有限元及其他有限元校正方法发现，DG方法在处理区域有裂缝或者某些凹角等问题的特征值问题中有更高的精度。同时，针对这些不规则的区域，本文给出了在这些区域上构造DG方法的详细过程，通过修改可以应用到其他类似的特征值问题中。

静电场在生物分子的计算过程中发挥着重要作用。静电相互作用是长程作用力，强烈地依赖于待研究的生物分子周围的溶液环境。因此，模拟该生物分子系统的计算量非常大。对连续模型，即考虑靠近生物分子的所有溶液中的分子或离子，而对于较远的溶液视为高介电常数的连续介质，本文针对一个点电荷的模型问题，提出三层分子模型，并且可以将其应用到大型生物分子计算中。对一个点电荷处于球形真空中，外面被水溶液或者离子溶液包围，如果介电常数在界面上不连续，反应电场会在球形区域内部靠近界面的时候出现问题。因此，本文在真空和溶液交界面构造了一个过渡层，其介电常数跟该处到球心的距离相关，并且使得介电常数在界面上也连续。这就克服了以前的模型中由于介电常数的不连续性导致的没有物理意义的反应场。

针对该三层模型，本文分别构造了半解析镜像电荷方法和最小二乘镜像电荷方法对其进行计算。通过跟序列形式的电势解析解比较发现，甚至只用一个镜像电荷，两种方法都能够很好的近似电势的精确解。特别地，通过选取多个镜像电荷，最小二乘镜像电荷方法可以得到非常高的精度。而且，在对离子溶液的计算中，最小二乘镜像方法不依赖于溶液强度。对于外层是水溶液的情形，针对不同位置的点电荷，本文给出了其相应的第一个和第二个镜像电荷，在以后的应用中可以直接通过表中的数据插值得到任意位置点上电荷的镜像电荷。

关键词: 间断Galerkin有限元方法(DG)，特征值问题，生物分子模拟，镜像电荷方法，泊松-玻尔兹曼方程