生物分子连续模型可视化仿真系统

白石阳

摘要

本文介绍了计算生物学中常用的两种连续模型，Poisson-Boltzmann 模型和 Poisson-Nernst-Planck 模型。目前，这两种模型的网格剖分和求解方法已经发展比较成熟，所以迫切的需要开发一款集成分子、网格、数值结果于一体的可视化软件，这种软件目前还比较匮乏。

可视化系统 MMV，分为分子、网格和数值计算三个部分。分子部分可以对生物分子分子计算力场并进行可视化。网格部分利用网格剖分软件 TMSmesh 生成分子表面网格，利用 Tetgen 生成体网格，进而实现网格可视化。针对非结构化网格，我们提出基于分子结构的区域划分索引，可以专门针对分子模型的非结构化网格采样进行加速。对所生成的网格，它使用了基于快速算法的 *AFMPB* 边界元软件和基于 PHG 并行有限元平台的离子通道 *ichannel* 程序进行求解，并对结果进行可视化分析。

我们的可视化系统考虑软件的可扩展性，用户可以通过扩展插件从而获得更多的功能。

关键词：连续模型，非结构化网格，可视化系统，有限元