三维离子通道内输运过程的有限元模拟

涂斌

摘要

离子通道是一种孔状蛋白，它既能构建细胞质膜，又能通过离子流 沿电化学梯度的流动来控制穿过细胞质膜的微弱电压梯度。 离子通道对于细胞和生物体极其重要， 掌控一系列的生理进程。 离子在通道蛋白中的输运的机制和性能是目前广泛关注的研究课题。在本文中，我们描述了一个模拟离子通过三维离子通道系统的并行有限元模拟器。 该模拟器包括了求解 PNP 和 SMPNP 方程的并行有限元解法器， 一条为离子通道系统产生网格的完整工具链以及可视化工具。

生成流形网格是有限元数值模拟生物分子中的一个亟待解决的问题。基于 TMSmesh 中使用的跟踪技术，我们提出了一种改进的网格生成方法，以避免自相交的单元和保持分子高斯表面的拓扑结构。 这种新的方法通过追踪沿着折线的极值点，将整个高斯曲面沿着 x，y，z 方向分成单值的曲面片。 我们建立了一条为大分子产生高质量体网格的工具链，该工具链由 TMSmesh 和其他几个网格工具组成。 基于 PHG，我们开发了一个求解 PNP 和 SMPNP 方程的并行有限元解法器。 我们最近的分析和研究表明，如果存在一个较强的静电电位（这通常发生在生物分子系统中）， NP 方程就会有一个大的漂移项（对流占优），这可能会导致标准的有限元方法在求解 PNP 方程时难以奏效。 我们引入了 SUPG 和 PRFB 这两种稳定化方法来提高解法器的鲁棒性。 在可视化方面，参与开发并改进了我们小组的 VCMM 程序，用于数值模拟结果的分析和非结构化网格的可视化。 VCMM 提供了一个交互式界面，由分子模块，网格模块和数值模块这三个模块组成。

该模拟器应用于几个真实的离子通道， 来计算静电势、离子浓度以及 I-V 曲线等。 其模拟得到的结果与 BD 模拟结果以及实验结果都十分相近。 为了测试稳定化方法的性能，SUPG 和 PRFB 这两种方法被用于模拟 VDAC 和 PA 离子通道。 我们发现解法器在引入了稳定化方法后，能有效地避免以前的数值不稳定。 此外，为了研究离子的尺寸效应，我们采用了一种包含尺寸效应的 SMPNP 模型对 VDAC 和 a-HL 通道进行了模拟测试。