分子静电和扩散过程的并行有限元计算与自适应网格生成

谢妍

摘 要

本文基于三维并行自适应有限元软件平台 PHG 开展了生物溶液中分子静电及扩散过程的模拟算法研究以及自动网格生成算法的工作.

分子静电及扩散过程方面, 我们研究了求解各类典型方程的有限元离散方法以及基于 Slotboom 变量的对称变换, 研制了并行有限元程序, 研究了几种低
松弛技术并分析了离散方程条件数, 使用了高阶有限元和自适应加密技术提高数值精度, 完成了小球模型以及 AChE 系统, DNA 片段的数值模拟. 我们还引入了 SUPG 和 PRFB 两种广泛使用的稳定化方法使得有限元模拟更加稳定, 并成功应用在了 Gramicidin A, VDAC, PA 等离子通道上, 通过静电势和离子浓度分布的信息计算了包括 I-V 曲线等静电特征.

为了生成复杂体系的有限元网格, 我们之前使用的是一个网格生成工具链,它由一系列现有软件或工具组成, 主要包含三部分: 表面网格的产生, 网格质量的提高以及四面体网格的生成. 本文中我们研究了一种新的网格生成方法, 它基于 PHG 的网格自适应局部加密和界面匹配功能, 具有更高的效率并且和有限元计算结合更加密切. 我们通过求解非线性 Poisson-Boltzmann 方程的后验误差估计, 溶剂化能, 最小二面角分布和最短最长边比率分布等数据验证了这种网格生成算法的有效性. 采用这种方法生成的网格不仅捕捉了原有几何外形,并且由于求解方程的过程紧随其后, 极大地缩短了从建模到模拟的周期.

最后, 我们指出了本文的一些可能的后续研究方向, 包括引入半导体方程计算中使用的指数基函数来改进有限元计算的稳定性, 以及基于几何流的网格质量优化来解决子网格表面磨光的问题.