变介电系数 PB/PNP 模型研究及并行有限元计算的实现

李翰林

摘要

本文研究了溶液的介电性质，提出了一种溶液介电系数模型，提出和计算了 VDPB 模型。基于新的溶液介电系数模型，作者将 VDPB 模型与其他研究者在变介电系数 PB 模型方面的研究工作相结合，改进和发展了原来的变介电系数 PB 模型，提出了一种新的变介电系数 PB/PNP 模型。

作者基于三维并行自适应有限元软件平台 PHG 开发了三维复杂区域的变系数方程的并行有限元求解器。通过采用显式迭代算法，改进了半隐式迭代算法容易发散和计算量大的缺点。在每一步迭代中，以浓度作为判据，针对特定情形对方程的形式进行化简，减少了迭代的计算量。作者对求解器的并行效率进行了测试，结果表明求解器的并行加速比是比较理想的。

我们对小球及 DNA 分子等对象进行了数值模拟，数值实验结果显示变系数模型在一定程度上改进了原始 PB/PNP 模型的缺陷，其计算结果与实验和动力学模拟的结果更加接近。具体来说，变介电系数模型相比原始模型在以下几个方面有较为明显的改进：（1）改进了原始模型在带电表面附近计算的反离子浓度过高的缺陷；（2）改进了原始模型无法正确反映带电表面附近的反离子竞争现象的缺陷；（3）改进了原始模型计算的 DNA 周围反离子浓度偏低的缺陷；（4）改进了原始模型计算的生物分子溶剂化能偏低的缺陷。我们结合模型对变系数模型改进原始模型计算结果的原因进行了解释。

关键词：介电系数，尺寸效应，泊松-玻尔兹曼方程，泊松-能斯特-普朗克方程，并行计算