快速边界元方法求解生物大分子中的静电问题

彭波

在分子尺度上对生物系统的研究主要通过生物分子在生理溶液中的相互间作用来获得。在众多的分子间相互作用中，长程静电作用力显得极其重要，对它的定量计算是了解生物分子的溶剂化效应、生物分子折叠和酶催化作用等的一个中心课题。长久以来，人们为了探寻生理细胞特殊生理功能表达，从数学上对其进行了大量地研究。凭借现代计算机技术的高速发展，科学家们可以在实验室对生物分子的生理功能进行模拟和预测。比起分子动力学模拟，隐含溶剂模型在效率上有了大大地提高。本文工作则是基于提高隐含溶剂模型在实际应用中的求解效率来展开的。

本文采用Cilk语言库将边界元方法求解泊松玻尔兹曼方程兼快速多极子算法的程序进行并行实现；结合Krylov子空间方法在求解大型复杂线性方程组时的高效性，在迭代中加入松弛策略进一步地提升了Krylov子空间的效率和计算精度；在边界元的预处理方面，一种经纬线划分球面的方法被融入到求解器中；纵观全文，作者从不同的角度对边界元算法的效率和求解实际工程问题的规模进行了极大程度的提升。实验表明，本文所提出的理论及算法具有计算效率高、求解规模大、适应性强等优势，具有良好的工程应用前景。