生物分子网格生成算法研究

刘田田

摘　要

随着生物分子的数学模型和数值模拟方法的发展，尤其是隐式溶剂模型，对生物分子网格生成的稳定性、有效性和网格质量提出了更高的要求。在数值模拟计算中，网格的质量会影响数值计算的收敛性和结果的精度。生物分子本身的不规则性和复杂性使得高质量网格的生成成为生物分子数值模拟过程中的一个难题。在本文中，我们主要发展了高质量生物分子网格生成的算法，并开发了稳定高效的生物分子网格生成软件。

生物分子的网格生成包括两个方面，表面网格生成和立体网格生成。表面网格主要应用于生物分子的可视化、几何计算和边界元模拟方法中。在本文中，我们首先研究了生物分子表面的定义，并比较了现有的生物分子表面网格生成软件。通过比较发现，目前没有适合生物大分子的高效的表面网格生成软件。因此，我们发展了一种可以快速为生物大分子产生高质量流形表面网格的算法，TMSmesh 2.0。TMSmesh 2.0 是在我们小组发展的表面网格生成软件 TMSmesh 的基础上进一步改进的。TMSmesh 2.0 采用自适应的策略将计算空间划分成大小不一的立方体盒子，在每个盒子中，于可控精度内用三线性表面近似高斯分子表面。为了保证网格的流形性，我们沿着极值线和关键点将三线性表面细分成单值的面片，最后进行三角化。TMSmesh 2.0 可以为任意大小的生物分子产生表面网格，并且运行速度比 TMSmesh 提高了几十倍。为了满足数值计算的需要，我们发展了一个三角形表面网格的优化包 SMOPT，进一步提高了 TMSmesh 2.0 的网格质量。

生物分子的立体网格主要应用于隐式溶剂模型的有限元求解中。在本文中，我们提出了两种为生物分子产生立体网格的方法。一种是基于表面网格产生贴体的四面体网格，另一种是直接进行网格加密产生贴体四面体网格。第一种方法是一条工具链，产生的网格更贴近生物分子的形状。第二种方法是基于 PHG 的自适应加密模块进行的，这种策略更高效。并且，我们把算法推广到膜 -离子通道系统和纳米管测序系统等复杂体系的立体网格生成中。实验结果表明这两种方法生成的网格都可以直接用于数值模拟计算中，包括生物分子的静电作用，离子通道内的扩散过程和纳米管测序等。另外，我们给出了基于生物分子网格的计算和应用，包括几何信息的计算、生物分子孔道的探测和连续模型的计算等。

关键词： 生物分子，网格生成，表面网格，立体网格，数值模拟