



▶ 新闻动态

- ▶ [图片新闻](#)
- ▶ [头条新闻](#)
- ▶ [综合新闻](#)
- ▶ [学术活动](#)
- ▶ [科研动态](#)

- [首页](#)
- [机构概况](#)
- [机构设置](#)
- [科研成果](#)
- [研究队伍](#)
- [研究生培养](#)
- [国际交流](#)
- [人才招聘](#)

现在位置: [首页](#) > [新闻动态](#) > [科研动态](#)

卢本卓在计算结构生物学领域取得最新研究进展

2011-10-08 | 编辑:

2010年6月,中国科学院国家数学与交叉科学中心生物医学研究部卢本卓与其合作者发布了“自适应快速多极矩Poisson-Boltzmann方程求解程序”软件包(AFMPB)的beta版本。这一工作总结了其近年在生物分子静电计算研究中丰富和发展了的边界元方法,并首次实现了与自适应新版快速多极矩的结合,在大分子的单CPU计算上取得最快的加速效果,这也代表了近年来国际上在边界元方法计算PB静电方面的最新进展。研究者介绍这一进展的文章“AFMPB: An Adaptive Fast Multipole Poisson-Boltzmann Solver for Calculating Electrostatics in Biomolecular Systems”刊登在了Computer Physics Communication杂志上。在Faculty of 1000 Biology评价系统中,分子静电领域权威专家美国西北太平洋国家实验室Nathan Baker这样推荐和点评了这篇文章:“文章描述了一组用于生物分子计算的激动人心的(exciting)、崭新的(new)方法和软件……”(http://f1000biology.com/article/id/3242956/evaluation)。Faculty of 1000 Biology是一个生物领域著名的在线科研评价系统,该机构专家每年对全球SCI文章总数不足千分之二的优秀精品生命科学和医学论文进行推荐和点评,并赋予“F1000论文”称号向科学界推荐,是一项很高的学术荣誉。

除此以外,卢本卓及其合作者在电扩散反应的连续模型、数值计算及其应用实践上也取得了一些探索性的结果。他们进一步改进了以前的杂交有限元/边界元方法,完全采用有限元方法实现了数值求解描述分子电扩散反应的Poisson-Nernst-Planck(PNP)耦合方程组,实现了用连续模型实时实形(生物分子)研究分子水平上的电扩散反应过程,预测了若干新的物理化学效应。这使其成为目前国际上建立了用有限元在分子水平上模拟电扩散反应过程的完整工具链的极少数小组之一。他与合作者题为“Poisson-Nernst-Planck Equations for Simulating Biomolecular Diffusion-Reaction Processes I: Finite Element Solutions”的相关文章发表在J. Comput. Phys.上。

另外,生物大分子的表面网格产生一直是一个公共难题。卢本卓与合作者发展了用表面求迹(Tracing)法来对生物分子的Gaussian Surface生成表面网格的新方法及其应用软件TSMesh。该方法对所测试到的任意大的生物分子都能稳定、高效地产生出比较高质量的表面网格,其中最大的病毒分子比通常程序能处理的分子大一个量级以上。这项工作克服了障碍有限元和边界元方法运用于生物大分子模拟的一个瓶颈问题,并进一步为整个分子立体网格的产生提供了一个可能的方案。

[\[关闭窗口\]](#)



研究院十年庆典

研究院电子政务平台
用户名:
密码:

中科院邮件系统

国家自然科学基金委

SEARCH

- [院长信箱](#)
- [地理位置](#)