

管入口方位角为  $10 \sim 20$  度区域内的内侧壁上,该区域同时也是振荡剪切因子值最高区。结论:数值模拟结果得到实验测量数据验证,证明数值模拟的方法和结果是可信的。数值模拟结果表明弯曲动脉内的速度剖面具有明显的非对称性,剖面形状在心动周期内发生复杂变化。计算结果发现弯管内侧壁面某些部位是低切应力和高振荡剪切因子区,是可能与动脉粥样硬化病变有关的扰动流区。

## 利用力致分子动力学模拟方法构建剪切流场

康英永,吕守芹,霍波\*,龙勉

(中国科学院微重力重点实验室,中国科学院力学研究所生物力学与生物工程中心,北京 100190)

在传统计算力学的研究领域,利用 Fluent 等软件实现连续介质流体的模拟,已有很成熟的经验及范例;同时,分子动力学模拟也在其擅长的微观结构分析及预测领域有了长足的发展。但是到目前为止,连续介质力学仍无法和分子动力学方法有机地结合起来。因此,仍无法在分子动力学模拟体系构建理想的(即速度梯度和温度可控的)剪切流场。Gratton 与 Delgado-Buscalioni 等的研究表明<sup>[1,2]</sup>,在分子动力学模拟中,利用经典力学中的流场模型,在原子尺度下定义的经验势场里同样可以形成流场。本课题组此前采用伊利诺斯州大学 Schulten 研究组开发的 SMD (Steered Molecular Dynamics) 方法建立了流场<sup>[3]</sup>,但是未能较好地模拟所期望的线性速度场。Chen 等利用恒力驱动固定区域中水分子的方法建立了流场<sup>[4]</sup>,但是该流场也有很多不足之处,如流速随模拟时间的增加而增大、温度随模拟时间的增加而升高且变得不稳定等等。NAMD 程序包由伊利诺斯州大学 Schulten 研究组开发。因为其具有很好的并行性、开放性,以及与其他程序的兼容性,该程序包得到了广泛应用。基于 NAMD 软件的 Tcl 接口并采用 TcBC 方法,我们编制了相应的程序来自定义边界条件并且实时更新水分子的牵拉力以控制其速度值。水盒子底部的厚度为  $5 \text{ \AA}$  的水分子层被固定。同时对水盒子顶部厚度为  $5 \text{ \AA}$  的水分子层以及一侧厚度为  $10 \text{ \AA}$  的区域内的水分子施加驱动力,以保证在更新时间段内水分子的速度梯度与目标梯度保持一致。此次模拟中,目标速度场是线性的。水盒子的所有边界均设置为周期性边界条件。模拟结果表明,当模拟  $20 \text{ ps}$  后,无论是否在牵拉区域内,所得到的速度梯度场均与目标值符合较好。在未控制温度的情况下,剪切流场的速度梯度最小可达到  $0.001 \text{ ps}$ ;在控制温度时,剪切流场的速度梯度最小可达到  $0.01 \text{ ps}$ 。该模拟方法的初步结果将有助于发展构建控制任意流体速度场的相关技术,最终为应用分子动力学模拟方法研究速度场对生物分子结构变化动力学的影响提供一个有力工具。(国家自然科学基金项目(30730032/10702075),科技部国家重大研究计划(2006CB910303)、科技部 863 项目(2007AA02Z306)和中国科学院知识创新工程项目(KJCX2-YW-L08)的资助, E-mail: huobo@imech.ac.cn; Tel: (010)82544132)

### 参考文献

- [1] Gratton Y, Slater GW. The European Physical Journal E. 2005 (17): 455-465.
- [2] Delgado-Buscalioni R, Coveney PV. Physica A-Statistical Mechanics and Its Applications. 2006 (362): 30-35.
- [3] Chen ZZ, Lou JH, Zhu C, et al. Biophysical Journal. 2008 (95): 1303-1313.