

# A U S H A N G

---

## FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

## D I S P U T A T I O N

**Freitag, 16. Oktober 2020, 10:00 Uhr**

**Ort: Seminarraum 032**

(Fachbereich Mathematik und Informatik, Arnimallee 6, 14195 Berlin)

**Disputation über die Doktorarbeit von**

**Herrn Abhinav Jha**

**Thema der Dissertation:**

**Numerical Algorithms for Algebraic Stabilizations of Scalar  
Convection-Dominated Problems**

**Thema der Disputation:**

**On Domain Decomposition Methods for Implicit Solvation Models**

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. V. John** durchgeführt.

**Abstract:**

A lot of chemical reactions of interest in chemistry and biology take place in a liquid phase and it is well noted that the solvent' effects play a crucial role in these processes. There are two widely used classes of models used to account for solvent' effects in the computation of the properties of a solvated molecule or ion, namely the explicit solvation models which adopt the molecular representation of both solutes as well as the solvent, and the implicit solvation models which treat the solute in a microscopic way and the solvent in a macroscopic way. Because of this microscopic treatment, implicit models are computationally more efficient and hence more popular.

In this talk, we will discuss the domain decomposition methods for implicit solvation models and will particularly focus on the Linear-Poisson-Boltzmann equations. We will look at their implementation and provide some numerical studies.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

**Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen**

**(Die Regeln des Hygieneplans des Fachbereichs müssen zwingend beachtet werden! Unter anderem gilt die Maskenpflicht für alle Beteiligten, während der gesamten Veranstaltung!)**

Der Vorsitzende der Promotionskommission  
Prof. Dr. V. John