

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

Donnerstag, 19. Dezember 2019, 15:00 Uhr

Ort: Hörsaal B (0.1.01)

(Fachbereich Physik, Arnimallee 14, 14195 Berlin)

Disputation über die Doktorarbeit von

Herrn Luigi Sbailo

Thema der Dissertation:

Efficient multi-scale sampling methods in statistical physics

Thema der Disputation:

Molecular Dynamics - Green's Function Reaction Dynamics

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. F. Noé** durchgeführt.

Abstract:

Simulation of the diffusion of mesoscopic particles can be obtained with a time discretization of the Langevin equation. In case of dilute systems, a brute-force integration of the dynamics of the particles is highly inefficient, due to the long computational time that is required to simulate particle encounters. Molecular Dynamics - Green's Function Reaction Dynamics (MD-GFRD) is an event-based algorithm that constructs propagation domains around isolated particles and propagate them with large displacements in space and time. In this Disputation talk, MD-GFRD will be discussed from an algorithmic and theoretical perspective, to show the improvement in computational performance this algorithm provides and to clarify the underlying physical assumptions that are made during simulations.

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

Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen

Der Vorsitzende der Promotionskommission
Prof. Dr. F. Noé