

Datum: 25. Oktober 2018

Einladung

Im Rahmen des Schwerpunktskolloquiums „Analysis und Numerik“ hält

Herr Prof. Dr. Benjamin Stamm
(Department of Mathematics RWTH Aachen University)

am **Donnerstag, dem 22. November 2018**, einen Vortrag zum Thema:

Numerical methods in continuum solvation models

Der Vortrag findet um **17:00 Uhr** in Raum **F 426** statt.

Es wird Gelegenheit gegeben, sich vorher (ab 16.30 Uhr)
im Common Center F 441 bei Tee und Kaffee zu treffen.

Alle Interessenten sind herzlich eingeladen.

Andrea Barjasic
Beauftragte für das Kolloquium

Abstract: In this talk, we will present numerical methods to efficiently discretize a family of PDEs arising in the computation of solvation energies raising from continuum solvation models. After giving an introduction to the context of theoretical chemistry we will discuss the challenges of numerical schemes for such problems. We will continue with introducing a family of numerical methods based on a domain decomposition strategy in combination of integral equations and illustrate numerical tests analysing the performance of the methods.