

Název práce: Simulace polymerů pomocí brownovské dynamiky

Autor: Alexandra Hájková

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Filip Uhlík, Ph.D.

Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Abstrakt: Tato práce se zabývá simulacemi makromolekul pomocí brownovské dynamiky se zahrnutím hydrodynamických interakcí. Pro aproximaci hydrodynamických interakcí v takovýchto simulacích se obvykle používá Rotne-Prager-Yamakavova (RPY) tenzoru. Při použití Choleského rozkladu RPY tenzoru je časová náročnost jednoho kroku simulace úměrná $O(N^3)$, což činí takové simulace velice výpočetně náročnými. Tato práce nabízí nový způsob aproximace hydrodynamických interakcí pomocí toeplitzovské matice již lze rozložit v čase úměrném $O(N^2)$ a tím značně urychlit simulaci. V této práci je nová metoda implementována, důsledně otestována oproti referenční RPY aproximaci a aplikována na lineární, cyklické a hvězdicové makromolekuly.

Klíčová slova: brownovská dynamika, makromolekuly, hydrodynamické interakce, Rotne-Prager-Yamakavův tenzor, toeplitzovská matice, Choleského rozklad