

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Hydrodynamik	3
2.1.1	Navier-Stokes-Gleichungen	3
2.2	Computersimulationen von hydrodynamischen Prozessen	4
2.2.1	Der Oseen-Tensor	5
2.2.2	Der Rotne-Prager-Tensor	7
2.2.3	Langreichweitige Wechselwirkungen	7
2.2.4	Periodische Randbedingungen	8
2.2.5	Ewald-Summation	9
2.2.6	Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors	12
3	Fehlerabschätzung	15
3.1	Allgemeine Fehlerberechnung der Nahfeld-Summe	16
3.1.1	Bestimmung der Extremstellen	19
3.1.2	Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe	23
3.2	Allgemeine Fehlerberechnung der Fernfeld-Summe	30
3.2.1	Bestimmung der Extremstellen	32
3.2.2	Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe	34
3.3	Fehlerberechnung für Oseen-Tensor	38
3.3.1	Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe	39
3.3.2	Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe	42
4	Parameteranalyse	45
4.1	Fehlerverhalten in Abhängigkeit von Parametern	45
4.2	Laufzeitabschätzung	48
5	Simulation	55
5.1	Brownian-Dynamics-Methode	55
5.1.1	Gradient des Rotne-Prager-Tensors in der Ewald-Summation	56
5.2	Verifizierung der Fehlerabschätzung	57
5.2.1	Fehlerstabilität	61
5.3	Verifizierung der Laufzeitabschätzung	61
6	Zusammenfassung und Ausblick	65
	Literaturverzeichnis	69