

Übungsbuch wollen wir zeigen, wie man sich die Kenntnisse zum Ge-
 leincomputern aneignen kann, um Aufgaben zu lösen, die für den Che-
 miker sind. Dabei werden die Problemstellung, die notwendigen Anwei-
 sungen, die Programmiersprache sowie die Elemente der benötigten Mathematik erläu-
 tert. Die Aufgaben bauen aufeinander auf, die Programme werden immer komplexer.
 Am Ende des Buches werden die Kapitel der Reihe nach empfohlen. Wer
 einzelne Aufgaben des Buches interessiert und außer der Bedienung
 des Computers wenig über dessen interne Operationen wissen will, kann sich auf
 die Programme auf den Rechnern, das Durcharbeiten der Aufgaben-
 blätter und das „Spielen“ mit den Programmen beschränken. Zu jeder Auf-
 gabe ist mit Hilfe eines abgedruckten Programmes gelöst wird, gibt es
 Übungsaufgaben, die der Leser – notfalls mit Benutzung von Fachbü-
 chern – selbst lösen soll.

Dieses Buch ist weder ein Anleitungsbuch zum Erlernen der BASIC-Sprache,
 noch ein elementarer Leitfaden der numerischen Mathematik sein. Beim Pro-
 grammieren wird es oft nützlich sein, eine BASIC-Anleitung gleichsam wie ein
 Nachschlagewerk zur Hand zu haben. Solche Anleitungen, die auch die nötigen Maschi-
 nenbefehle, stellen die Hersteller der Computer zur Verfügung. Wer aber
 die mathematischen Methoden findet, dem kann nur empfohlen wer-
 den, ein mathematisches Numerikbuch zur Hand zu nehmen.

Das Buch wendet sich sowohl an Studenten der Chemie in höheren Semestern
 als auch an Praktiker in Labor und Technik.

Die Veranstaltungen an der Universität Heidelberg haben wir die Erfahrung ge-
 macht, die Programmiersprache und das Einarbeiten in die Programmiertechnik
 erlernt wird, als mancher zunächst angenommen hatte. Sobald die an-
 wendungen überwunden sind, erkennt man die Nützlichkeit dieser Methoden

Die Fertigstellung der Druckvorlage und für Mithilfe bei der Korrektur danken
 wir Herrn Matthias Frey und Herrn Ulrich Schröder sehr herz-

Heidelberg, 11. November 1982

Klaus Ebert
 Hanns Ederer

Inhalt

1	Einleitung	1
1.1	Allgemeines	1
1.2	Problemanalyse	1
1.3	Die wichtigsten Befehle	6
2	Formeln	11
2.1	Einführung in Programmiersprachen	11
2.2	Zeilennummern in BASIC	14
2.3	Die Korrektur von Programmen	14
2.4	Bezeichnung von Variablen	15
2.5	Erste BASIC-Sprachelemente	16
2.5.1	Dateneingabe	16
2.5.2	Datenausgabe	17
2.5.3	Die Zuweisung	17
2.6	Die Darstellung von Zahlen	18
2.7	Arithmetische Ausdrücke	19
2.8	Festprogrammierte Standard-Funktionen	21
2.9	Unbedingte Programmsprünge	21
2.10	Der „direkte Modus“	24
2.11	Berechnung der Fläche eines Dreiecks	24
2.12	Mittlere freie Weglänge	29
2.13	Die Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung	31
2.14	Volumendichte der Strahlungsenergie nach PLANCK	34
2.15	Umrechnung von Grad Celsius in Grad Fahrenheit	36
2.16	Diffusionspotentiale in Elektrolytlösungen	37
2.17	Ausströmgeschwindigkeit eines Gases	37
3	Reihen	41
3.1	Die geometrische Reihe	42
3.2	Fourier-Reihen	45
3.3	Wärmeleitung nach dem 2. Fourier'schen Gesetz	47
3.4	Zustandssummen	50
3.5	Monte-Carlo-Methode für die Kreiszahl π	54