

# 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 $\pi$ .....	54

4	Schleifen .....	57
4.1	Berechnung von Summen .....	57
4.2	Das Aufstellen von Tabellen .....	62
4.3	Mittelwerte und Standardabweichung .....	66
4.4	Monte-Carlo-Integration .....	69
4.5	Berechnung der Summenformel aus Elementaranalysen .....	74
4.6	Der bedingte Sprung .....	76
4.7	Summenformeln aus der Massenspektrometrie .....	78
5	Integration .....	83
5.1	Die Integration nach Euler .....	84
5.2	Berechnung des Umfangs einer Ellipse .....	92
5.3	Simulation eines Copolymeren .....	95
5.3.1	Der Doppelpunkt in BASIC .....	98
5.4	Die Integration nach Simpson .....	100
5.5	Integration mit Abbruchkriterien .....	103
5.6	Spezifische Molwarmen nach Debye .....	107
5.7	Virialkoeffizient aus Potentialkurven .....	110
6	Gleichungen .....	119
6.1	Die Zweiersuche .....	120
6.2	Die Nullstellensuche nach Newton .....	129
6.3	Die Nullstellensuche nach der ‚regula falsi‘ .....	133
6.4	Thermospannung eines Ni-CrNi-Thermoelementes .....	138
6.5	Die Persistenzlange eines Polymermolekuls .....	141
6.6	Berechnung der Trennwirkung bei der Rektifikation .....	143
6.7	Der pH-Wert einer schwachen Saure .....	148
6.8	Iterative Methode .....	155
7	Indizierte Variablen .....	157
7.1	Sortieren von Zahlen und Wortern .....	160
7.2	Monte-Carlo-Berechnung einer Kinetik 1. Ordnung .....	164
7.3	Multiplikation quadratischer Matrizen .....	166
7.4	Die Algebra komplexer Zahlen .....	169
7.5	Bragg’sche Streuwinkel bei der Rontgenbeugung .....	173
7.6	Simulation einer Gaschromatographie-Saule .....	180
7.7	Lineare Regression .....	184
7.8	Lineare Regression mit Fehlerabschatzung .....	189
8	Lineare Systeme .....	193
8.1	Unterprogramme .....	194
8.2	Lineare Gleichungssysteme .....	198
8.3	Die allgemeine lineare Regression .....	206
8.4	Die Inversion einer quadratischen Matrix .....	218

8.5	Die Bestimmung von Eigenwerten einer Matrix .....	225
8.6	Die Berechnung der Anzahl von Isomeren .....	231
9	Differentialgleichungen .....	239
9.1	Das Verfahren nach Euler-Cauchy .....	241
9.2	Das verbesserte Verfahren nach Euler .....	248
9.3	Das Verfahren nach Runge-Kutta .....	252
9.4	Systeme von Differentialgleichungen nach Euler .....	256
9.5	Systeme von Differentialgleichungen nach Runge-Kutta .....	261
9.6	Ein Randwertproblem .....	270
9.7	Der harmonische Oszillator – ein Eigenwertproblem .....	276
9.8	Partielle Differentialgleichungen .....	281
9.9	Stationäre Lösungen partieller DGL's .....	289
10	Interpolationen .....	297
10.1	Das Lagrange'sche Interpolationsverfahren .....	297
10.2	Interpolieren mit Splinefunktionen .....	302
11	Nichtlineare Systeme .....	309
11.1	Nichtlineare Gleichungssysteme .....	309
11.2	Die nichtlineare Regression .....	321
12	Nichtnumerische Datenverarbeitung .....	345
12.1	DGL-System aus einem Reaktionsmechanismus .....	346
12.2	Ein Computerspiel .....	355
12.3	Game of Life .....	363
13	Plotten .....	373
13.1	Graphische Spielereien .....	376
13.2	Lineare Regression mit Graphik .....	379
13.3	Differentialgleichungen mit Graphik .....	384
13.4	3-D-Graphik .....	399
13.5	Kontur-Plot .....	406
14	Datenerfassung .....	413
14.1	Meßwarterfassung .....	414
14.2	Schnelles Sortieren .....	420
14.3	Regredierender Spline .....	425
14.4	Steife Differentialgleichungen .....	438
15	Literatur .....	449
16	Verzeichnisse .....	453
16.1	Programmverzeichnis .....	453
16.2	Verzeichnis der BASIC-Sprachelemente .....	454
	Register .....	455