match no. 30 pp. 291 1994

Programme zur Formalen Begriffsanalyse

ANACONDA.PRG Betriebssystem: ATARI-GEM
Programm zum Zeichnen von Liniendigrammen von Begriffsverbänden.Preis: 500,–DM

CONIMP4.EXE Betriebssystem: MS-DOS und ATARI-TOS
Programm zur Bearbeitung einwertiger Kontexte und deren Implikationen (Begriffslisten, Vorgänger-, Nachfolgerlisten, Merkmalsexploration). Keine Zeichenfunktionen. Englische Version von BAV3.EXE

DIAGRAM.EXE Betriebssystem: MS-DOS
Programm zum Zeichnen von Liniendiagrammen. Gestufte Diagramme sind möglich. Bedienung mit Maus oder Tastatur. Menügesteuert.

MBA.EXE Betriebssystem: MS-DOS
Analyse und Bearbeiten von mehrwertigen Kontexten. Skalierung mit vorgegebenen Skalen. Berechnung von Abhängigkeiten.

MEHRWERT.TOS Betriebssystem: ATARI-TOS
Analyse und Bearbeiten von mehrwertigen Kontexten. Skalierung mit vorgegebenen Skalen. Berechnung von Abhängigkeiten.

Ornament Betriebssystem: ATARI-GEM
Das Programm dient zum Bestimmen von ebenen Symmetriemustern und zum Zeichnen von Symmetriemustern. Ein Symmetriemuster kann durch Eingabe von Symmetrieoperationen, die dieses Muster invariant lassen, mit Hilfe des Begriffsverbandes der 17 ebenen Symmetriemuster bestimmt werden. Zum Zeichnen wird eine Symmetriegruppe aus den 17 verschiedenen ausgewählt. Diese wird auf die gezeichneten Linien beim interaktiven Zeichnen angewandt und man zeichnet so das symmetrische Muster. Das Programm wurde erstellt anläßlich der Symmetrieausstellung 1986 in Darmstadt.

TOSCANA Betriebssystem: MS-Windows
Analysewerkzeug und Erkundungssystem für Begriffliche Datensystem. Das Programm setzt auf relationalen Datenbanken auf. Preis auf Anfrage.

ZEICHNEN.PRG Betriebssystem: ATARI-GEM
Zeichnen von Begriffsverbänden. Additive Liniendiagramme.

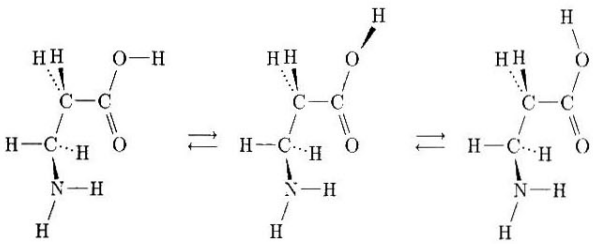
Es gibt eine Diskette für MS-DOS (5,25", 1,2MB) mit CONIMP4.EXE (inkl. TeX-Source der Dokumentation), DIAGRAM.EXE, MBA.EXE und eine Diskette für Atari (3,5", 720kB) mit CONIMP4.PRG (inkl. TeX-Source der Dokumentation), MEHRWERT.TOS, ZEICHNEN.PRG Diese Disketten werden gegen Unkosten von 10DM pro Diskette im wissenschaftlichen Bereich abgegeben.
ORNAMENT.PRG ist PublicDomain und wird gegen Einsendung einer 720kB, 3.5" Diskette abgegeben.
Weiter Programme für spezielle Aufgaben können wir nach Absprache anbieten. Wir sind gerne zu Kooperationen für einzelne Projekte bereit.

Anfragen an skorsky@mathematik.th-darmstadt.de oder an
ERNSTSCHRÖDERZENTRUM
für Begriffliche Wissensverarbeitung e.V.
Schloßgartenstr. 7 (THD, FB4)
64289 Darmstadt

Chemical Structure Formulas With TeX/LaTeX

Two macro packages were developed for the handling of chemical structure formulas within LaTeX, which complement each other. The first was published in 1987 [1]; its scope are larger organic structures like cyclohexane, condensed rings, heterocycles, or polyenes, for which only the bonds of the molecular backbone are drawn and all unlabelled atoms are assumed to be carbon.

The focus of this short contribution is on the second macro package, which is described in the proceedings of the TeX88 Conference [2]. This package is oriented towards smaller molecules, for which all atoms and bonds are drawn. An example of this style is given in the reaction sequence below. This macro package was designed to work in the plain TeX environment, hence all above-plane bonds and the ring symbol in aromatic systems are generated by a sequence of rule boxes. This approach does not require any additional fonts, but it requires a significant amount of memory (7071 words for the definitions plus several thousand words for the formulas, depending on their complexity; the example shown here needed 11712 words). Of course this package works in the LaTeX environment too. The macros may be obtained directly from the author via e-mail (F5351DAA@AWIUNI11.BITNET).

[1] R. T. Haas and K. C. O'Kane, *"Typesetting Chemical Structure Formulas with the Text Formatter TeX/LaTeX"*, Comp. Chem. **11**, 251–271 (1987)

[2] M. Ramek, *"Chemical Structure Formulæ and x/y Diagrams with TEX"* in: M. Clark (ed.), *"TEX: Applications, Uses, Methods"*, Ellis Horwood Publishers, Chichester, 1990, p. 227 258