

1. Einleitung und Motivation	1
2. Analyse von Non-Standard-Anwendungen	7
2.1 Beschreibung verschiedener Anwendungsklassen	8
2.2 Einige Prototypsysteme aus den Ingenieur Anwendungen	13
2.2.1 Das KUNICAD-System	16
2.2.1.1 Systembeschreibung	16
2.2.1.2 Systembewertung	26
2.2.2 Das DBGEO-System	31
2.2.2.1 Systembeschreibung	32
2.2.2.2 Systembewertung	38
2.2.3 Das DBCHIP-System	44
2.2.3.1 Systembeschreibung	44
2.2.3.2 Systembewertung	50
2.3 Wissensbasierte Systeme	53
2.3.1 Aspekte der Datenhaltung in Expertensystemen am Beispiel des DBMED-Systems	53
2.3.2 Wissensrepräsentation mit Frames	57
2.4 Charakteristika der Non-Standard-Anwendungen	64
2.4.1 Verallgemeinerung der Abbildungshierarchie	64
2.4.2 Flexible Objektbeschreibung und Objektverarbeitung	65
2.5 Anforderungen an adäquate Datenmodelle	68
3. Das Molekül-Atom-Datenmodell	71
3.1 Die grundlegenden Konzepte des MAD-Modells	71
3.2 Die Sprache MQL	76
3.2.1 Die Datendefinitionssprache	76
3.2.2 Die Datenmanipulationssprache	80
3.2.2.1 Überblick über die DML-Anweisungen	81
3.2.2.2 Die FROM-Klausel	84
3.2.2.3 Die WHERE-Klausel	89
3.2.2.4 Die Projektion	96
3.2.2.5 Die DML-Anweisungen	98
3.2.3 Die Lastdefinitionssprache	105
3.3 Formalisierung des MAD-Modells	108
3.3.1 Eine Atomtypalgebra	108
3.3.2 Eine Molekültypalgebra	118

3.4 Beispiele und Abgrenzung zu anderen Datenmodellen	133
3.4.1 Verwendungsbeispiele für MQL	133
3.4.2 Abgrenzung zu anderen Datenmodellen	137
4. Implementierung des MAD-Modells	142
4.1 Architekturvorschläge für NDBS	142
4.1.1 Die Zusatzebenen-Architektur	143
4.1.2 Die Kombinations-Architektur	144
4.1.3 Die Erweiterungs-Architektur	145
4.1.4 Die NDBS-Kern-Architektur	146
4.2 Das PRIMA-System	147
4.2.1 Systembeschreibung	148
4.2.2 Dynamische Aspekte	152
4.3 Das Zugriffssystem	155
4.3.1 Überblick über die Datenabbildung und Verarbeitungsaspekte	156
4.3.2 Die Zugriffssystemschnittstelle	159
4.3.2.1 Metadatenoperationen	159
4.3.2.2 Operationen auf Atomen	160
4.3.2.3 Operationen auf Atommengen	160
4.4 Das Datensystem	161
4.4.1 Verfeinerung der Komponentensicht	162
4.4.2 Anweisungsübersetzung	165
4.4.2.1 Techniken zur Anfragetransformation	166
4.4.2.2 Überblick über die einzelnen Übersetzungsschritte	171
4.4.3 Anweisungsausführung	173
4.4.3.1 Aufbau einfacher Moleküle	174
4.4.3.2 Aufbau komplexer Moleküle	175
4.4.3.3 Beispiel	177
4.4.4 Implementierungsstruktur	179
4.4.5 Bewertung	183
5. Zusammenfassung und Ausblick	185
Abbildungsverzeichnis	191
Tabellenverzeichnis	193

Anhang	
A Das Meß- und Analysesystem MESASU	194
A.1 Die Grobarchitektur von MESASU	194
A.2 Das Modell zur Analyse der Meßdaten	195
A.2.1 Voraussetzung und Begriffsbildung	195
A.2.2 Analyseverfahren	197
A.3 Verwendungsmöglichkeiten von MESASU	202
A.4 Beispielanalysen	202
B MQL-Syntax	210
C Hilfsdefinitionen	220
Literaturverzeichnis	223