

KfK 3258
Dezember 1981

Das interaktive Auskunftssystem ADAMSS

M. Bauer, P. Groll
Institut für Heiße Chemie

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Heiße Chemie

KfK 3258

Das interaktive Auskunftssystem ADAMSS

M. Bauer P. Groll

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung:

Das interaktive Auskunftssystem ADAMSS ermöglicht innerhalb einer vom Datenbanksystem ADABAS verwalteten Massenspektrenbibliothek die Identifikation von Massenspektren gleicher, vorab festgelegter Charakteristika.

Abstract:

The Interaktive Informationssystem ADAMSS

The interaktive informationssystem ADAMSS renders the identification of mass spectra with identical especially defined characteristics within a mass spectra library, supervised by the data bank system ADABAS.

Inhalt:

Seite

1	Überblick über das Gesamtsystem	1
1.1	Aufgabenstellung und Zusammenfassung	1
1.2	Realisierung	2
1.3	Teilbereiche	2
1.3.1	Datenreduktion	2
1.3.2	Generierung der ADABAS-Bibliothek	2
1.3.3	Interaktives Suchprogramm ADAMSS	2
1.4	Organisation der TSO-Dateien	3
2	Datenreduktion	4
2.1	Steuerkarten	4
2.2	Quellprogramm	4
3	Generierung der ADABAS-Bibliothek	8
3.1	Steuerkarten und Datenbankbeschreibung	8
4	Interaktives Suchprogramm ADAMSS	11
4.1	CLIST-Prozeduren	11
4.1.1	Übersetzen und Linken	11
4.1.2	Ausführen	13
4.2	Funktioneller Zusammenhang	15
4.3	ADABAS-Kontrollvariable	16
4.4	Anwendung und Ablauf	19
4.4.1	Formulierung des Suchkriteriums	24
4.5	Dialogbeispiel	26
5	Liste des Dialogprogramms	35
6	Liste des Background-Jobs	59
6.1	Steuerkarten	59
6.2	Quellprogramm	59
7	Literaturhinweise	63

1 Überblick über das Gesamtsystem

1.1 Aufgabenstellung und Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert das interaktive Auskunftssystem ADAMSS = ADABAS - Massen Spektren Suche. Es wurde zur Unterstützung des Arbeitsbereichs -Organische Analytik- entwickelt. Es basiert im wesentlichen auf einer Massenspektrensammlung organischer Verbindungen mit 32170 Einzelspektren aus den USA, die vom Datenbanksystem ADABAS verwaltet wird, das in der Hauptabteilung Datenverarbeitung und Instrumentierung (HDI) des Kernforschungszentrums Karlsruhe zur Verfügung steht.

Eine in ihrer Zusammensetzung unbekannte Probe oder Substanz -mischung wird mit Hilfe der Gaschromatographie möglichst in die Einzelsubstanzen aufgetrennt. Während dieser Trennoperation werden kontinuierlich Massenspektren aufgenommen. Von jenen Massenspektren, die am Maximum der GC-Peaks aufgenommen wurden, und die aus einer Tabelle von Massen und Intensitäten bestehen, werden charakteristische Masse-Intensitäts-Paare vom Anwender dem Auskunftssystem zugeführt, das seinerseits Spektren mit gleichen Eigenschaften liefert.

Die mit dieser Analysenmethode bearbeiteten Proben sind Oberflächenwässer, deren Belastung mit organischen chemischen Verbindungen bestimmt werden soll. Diese Arbeiten werden national durch das Bundesumweltamt im Auftrag des BMI koordiniert. Sie sind ein Beitrag der Bundesrepublik Deutschland zur konzertierten Aktion Projekt 64b/bis der Europäischen Gemeinschaft, an der 15 europäische Staaten beteiligt sind.

1.2 Realisierung

Konzipiert wurde das Gesamtsystem auf der Großrechenanlage IBM/370-168 und /3033 der Hauptabteilung Datenverarbeitung und Instrumentierung. Verwendete Programmiersprache ist FORTRAN IV. Neben dem Datenbanksystem ADABAS notwendiges Anwendungshilfsmittel ist das TIME-SHARING-System TSO. Als Datenträger für Eingabe-, Zwischen- und Ergebnisdateien werden Magnetplatten des derzeitigen Typs 3350 und 3330-1 sowie Magnetbänder verwendet.

1.3 Teilbereiche

1.3.1 Datenreduktion

Vor der Anwendung von ADAMSS werden die Daten der Massenspektren, die als Bibliothek auf 2 Magnetbandkopien vorliegen, bis auf das für den späteren Vergleich absolut notwendige, ADABAS-konforme Minimum reduziert und auf Magnetband als Zwischendatei abgelegt.

1.3.2 Generierung der ADABAS-Bibliothek

Die reduzierten Datensätze werden dem ADABAS-Dienstprogramm ADAWAN zugeführt, das sie entsprechend der angegebenen ADABAS-Datenbankdefinition überprüft und in modifizierter Form auf einem Magnetband ablegt, von wo sie später durch die Dienstprogramme LOAD bzw. ADDLOAD in die entgeltliche ADABAS-Datenbank eingespielt werden.

Hinweis:

Die unter 1.3.1 und 1.3.2 angesprochenen Maßnahmen sind in der Regel nur einmal vor Anwendung des Suchprogramms ADAMSS notwendig. Ansonsten wäre eine Wiederholung nur im Falle einer Zerstörung der Originaldaten auf Band oder Platte angebracht.

1.3.3 Interaktives Suchprogramm ADAMSS

Das interaktive Suchprogramm ADAMSS ist der zentrale Bereich des Gesamtsystems. Es ermöglicht die Suche nach den 21 als Deskriptoren definierten (s.3.1 Datenbankbeschreibung) Datenfeldern. Neben diesen sind außerdem 3 weitere Datenfelder für die Ausgabe vorgesehen. Diese sieht neben der unmittelbaren Bildschirmausgabe auch diejenige auf Platte und Drucker vor.

1.4 Organisation der TSO-Dateien

Für die reibungslose Erstellung der Eingabedateien sowie Anwendung des Systems sind verschiedene, im folgenden mit kurzen Erläuterungen aufgeführte TSO-Dateien notwendig:

<u>Name</u>	<u>Organisation</u>	<u>3350-Spuren</u>
ADALILO.CLIST	PS	1
ADAMSS.CLIST	PS	1
MSPRINT.DATA	PS	1 (+n)
MSSUCHE.DATA	PS	1 (+n)
MSSUCHE.FORT	PS	6
MSSUCHE.LOAD	PO	34
- MSSUCHE		
- ADALOAD		
PP64B.CNTL	PO	1
- ADAPRINT		
- ADATAPE		
- ADAWAN		
PP64b.FORT	PO	1
- ADAPRINT		
- ADATAPE		
CODETRAN.ASM	PS	2

(+n) = Zuschlag je nach Umfang der per Dialog erzeugten Daten.

Die CLIST-Prozeduren ADALILO und ADAMSS sind der zentrale Kern des gesamten Systems (s.4 Interaktives Suchprogramm ADAMSS). Sie erfordern für ihren korrekten Ablauf die sequentiellen Dateien

MSSUCHE.FORT
MSSUCHE.DATA
MSPRINT.DATA
CODETRAN.ASM

sowie die Member

MSSUCHE
ADALOAD
ADAPRINT

der partitioned organisierten Dateien

MSSUCHE.LOAD
PP64B.CNTL
PP64B.FORT .

Die Member

ADATAPE
ADAWAN

der partitioned organisierten Dateien

PP64B.CNTL
PP64B.FORT

sind für die Maßnahmen unter 1.3.1 und 1.3.2 erforderlich.

2 Datenreduktion

2.1 Steuerkarten

```
//HCH610US JOB (0610,220,POIOL),ROTH,NOTIFY=HCH610,MSGLEVEL=(1,1),
// TIME=(26,0),REGION=512K
// EXEC FGASCLG
//C.SYSIN DD DSN=TSO610.PP64B.FORT(ADATAPE),DISP=SHR
//A.SYSIN DD DSN=TSO610.CODETRAN.ASM,DISP=SHR
//G.FT10F001 DD DSN=MSSS,UNIT=T6250,VOL=SER=DV2779,DISP=(OLD,PASS),
//          LABEL=(1,SL,,IN)
//G.FT20F001 DD DSN=USADABAS,UNIT=T6250,VOL=SER=DV2781,
//          DCB=(LRECL=1910,BLKSIZE=19100,RECFM=FB,DEN=4),
//          DISP=(NEW,PASS)
//
```

2.2 Quellprogramm

```
C-----
C   UEBERTRAGUNG DER ADABAS-RELEVANTEN INFORMATION VON DER
C   USA-MS-DATENBANK AUF BAND
C   - SPEKTRENNUMMER
C   - MOLEKULARGEWICHT
C   - 10 INTENSIVSTEN MASSES + IHRE INTENSITAETSWERTE
C   - MOLEKULARFORMEL
C   - NOMENKLATUR
C-----
C   LOGICAL*1 STR1(1800),STR2(30),ANZA(4)
C   INTEGER*2 ARRAY(3000),MW,PU,NCF,NPEAK,LMG,LNOM,BLK2/'  '/,
C   + NOMEN(900),FORMEL(15)
C   INTEGER*4 COPY(100),IREC,UNIT,LHDR,CAS,SPECN,EPA,MAX,MOL,MAXSP,
C   + NPEAK2,FULL/4/,HALF/2/,PEAKBE,ZPEAK,MAXINT,ZEP,
C   + HDRMAX,NCFMAX,I1,I2,K1,LMG2,LMG4,LNOM2,LNOM4,MOLFBE,
C   + NOMBE,I4ZF,TAPE,INOM,
C   + MMAX(10),IMAX(10),MVER(750),IVER(750),
C   + MASS(750),INTE(750),
C   + ICODE
C
C   EQUIVALENCE (ARRAY(1),SPECN),(ARRAY(3),CAS),(ARRAY(5),EPA),
C   + (ARRAY(21),MW),(ARRAY(36),PU),(ARRAY(37),NCF),
C   + (ARRAY(39),NPEAK),(ARRAY(40),LMG),(ARRAY(42),LNOM),
C   + (NOMEN,STR1),(FORMEL,STR2),(I4ZF,ANZA)
C
C-----FORMATE
C
C   1 FORMAT(1X,'*** HEADER > HDRMAX ODER NCF > NCFMAX ***')
C   2 FORMAT(I4,10(I4,I3),I5,30A1,A1,25(72A1))
C
C-----KONSTANTE
C
C   TAPE=20
C   UNIT=10
```

```
C-----MAX. SPEKTRENZAHL: 32170-----
      MAXSP=32170
      HDRMAX=18
      NCFMAX=6
      PEAKBE=45
C
C-----INITIALISIERUNG
C
      DO 30 I=1,15
      FORMEL(I)=BLK2
      30 CONTINUE
      DO 40 I=1,900
      NOMEN(I)=BLK2
      40 CONTINUE
C
C-----LESEN DES COPYRIGHT
C
      READ(UNIT) N,(COPY(I),I=1,N)
C
C-----LESEN UND VERARBEITEN DER DATENRECORDS
C
      DO 500 J=1,MAXSP
      READ(UNIT,END=900) L,LHDR,(ARRAY(I-1),I=2,L),(ARRAY(I+L-2),I=2,L)
      IF(LHDR.GT.HDRMAX.OR.NCF.GT.NCFMAX) GOTO 300
      LMG4=LMG
      LMG2=LMG4/HALF
      IF(MOD(LMG4,FULL).GT.0) LMG2=(((LMG4+FULL)/FULL)*FULL)/HALF
      LNOM4=LNOM
      LNOM2=LNOM4/HALF
      IF(MOD(LNOM4,FULL).GT.0) LNOM2=(((LNOM4+FULL)/FULL)*FULL)/HALF
C
C-----MOLEKULARGEWICHT
C
      MOL=MW
C
C-----MASSEN/INTENSITAETEN
C
      ZPEAK=NPEAK
      NPEAK2=ZPEAK*HALF-1
      DO 100 I=1,NPEAK2,2
      I2=(I+1)/2
      I1=(PEAKBE-1)+I
      MASS(I2)=ARRAY(I1)
      INTE(I2)=ARRAY(I1+1)
      100 CONTINUE
C
C-----AUSSONDERUNG DER INTENSITAETEN > 0 / MASSEN >= 45
C
      ZEP=0
      DO 110 I=1,ZPEAK
      IF(INTE(I).EQ.0.OR.MASS(I).LT.45) GOTO 110
      ZEP=ZEP+1
      MVER(ZEP)=MASS(I)
      IVER(ZEP)=INTE(I)
      110 CONTINUE
```

C
C-----ERMITTLUNG DER 10 INTENSIVSTEN MASSEN
C

```
DO 160 I=1,10
  IF(I.GT.ZEP) GOTO 140
  MAX=1
  IF(ZEP.EQ.1) GOTO 130
  DO 120 K=2,ZEP
    IF(IVER(K).GT.IVER(MAX)) MAX=K
  120 CONTINUE
  130 MMAX(I)=MVER(MAX)
    IMAX(I)=IVER(MAX)
    IVER(MAX)=0
    GOTO 160
  140 K1=ZEP+1
    DO 150 K=K1,10
      MMAX(K)=0
      IMAX(K)=0
    150 CONTINUE
    GOTO 170
  160 CONTINUE
```

C
C-----NORMIERUNG AUF 100 %
C

```
170 MAX=1
  DO 180 I=2,10
    IF(IMAX(I).GT.IMAX(MAX)) MAX=I
  180 CONTINUE
  MAXINT=IMAX(MAX)
  IF(MAXINT.EQ.0) GOTO 200
  DO 190 I=1,10
    IMAX(I)=(IMAX(I)*100)/MAXINT
  190 CONTINUE
```

C
C-----MOLEKULARFORMEL
C

```
200 MOLFB=PEAKBE+NPEAK2+1
  DO 210 I=1,LMG2
    I1=(MOLFB-1)+I
    FORMEL(I)=ARRAY(I1)
  210 CONTINUE
```

C
C-----NOMENKLATUR
C

```
NOMBE=MOLFB+LMG2
DO 220 I=1,LNOM2
  I1=(NOMBE-1)+I
  NOMEN(I)=ARRAY(I1)
220 CONTINUE
```

C
C-----CODEWANDLUNG
C

```
ICODE=6
CALL CODTRA(STR2,LMG4,ICODE)
CALL CODTRA(STR1,LNOM4,ICODE)
```

```
C
C-----BESTIMMUNG DER ZAHL DER FELDER/NOMENKLATUR
C
      I4ZF=LNOM4/72
      IF(MOD(LNOM4,72).GT.0) I4ZF=I4ZF+1
C
C-----AUSGABE AUF BAND
C
      INOM=I4ZF*72
      WRITE(TAPE,2) MOL,((MMAX(K),IMAX(K)),K=1,10),SPECN,STR2,ANZA(4),
+      (STR1(K),K=1,INOM)
C
C-----NEUINITIALISIERUNG
C
      DO 270 I=1,15
      FORMEL(I)=BLK2
270 CONTINUE
      DO 280 I=1,900
      NOMEN(I)=BLK2
280 CONTINUE
      GOTO 500
300 WRITE(6,1)
C
500 CONTINUE
900 STOP
      DEBUG SUBCHK
      END
```

Dieses Programm liest die Originaldaten der Massenspektren aus der Bibliothek auf Band, reduziert sie auf das ADABAS-notwendige Minimum:

```
-----
I           I
I   -   Spektrennummer           I
I   -   Molekulargewicht         I
I   -   10 Massen  $\geq$  45 mit den  I
I       10 größten, absteigend sortierten, I
I       auf 100 % normierten Intensitäten I
I   -   Nomenklatur.             I
I           I
-----
```

Das Format entspricht der später erläuterten Definition der ADABAS-Datenbank (s.3.1 Datenbankbeschreibung). Bedingt durch einige nicht druckbare Sonderzeichen in den Nomenklaturen erfolgt zusätzlich eine Codewandlung anhand einer speziell dazu erstellten EBCDIC-TSO-Konversionstabelle. Die reduzierten Daten werden auf einem Band als Zwischendatenträger abgelegt, das wiederum als Eingabemedium für das Dienstprogramm ADAWAN dient.

3 Generierung der ADABAS-Bibliothek

Dieser Bereich beinhaltet zwei Aktionen, einmal den unter 3.1 erläuterten ADAWAN-Lauf, zum anderen den unter 3.2 erläuterten LOAD- bzw. ADDLOAD-Lauf. Die LOAD-Läufe, d.h. das eigentliche Laden der ADABAS-Bibliothek mit den überprüften Daten können nur vom Datenbank-Administrator der HDI vorgenommen werden.

3.1 Steuerkarten und Datenbankbeschreibung

```
//HCH610AD JOB (0610,220,POIOL),ROTH,NOTIFY=HCH610,TIME=(10,0)
// EXEC ADABAS
//A.DDAUSBA DD DSN=ADAWAN,UNIT=T6250,VOL=SER=DV2782,
//          DCB=(RECFM=F,LRECL=4096,BLKSIZE=4096,DEN=4),
//          DISP=(NEW,PASS)
//A.DDEINBA DD DSN=USADABAS,UNIT=T6250,VOL=SER=DV2781,
//          DISP=(OLD,PASS),LABEL=(1,SL,,IN)
//A.SYSIN DD *
01,MW,4,A,FI,DE          MOLEKULARGEWICHT
01,GO                    GRUPPE (I)
02,MO,4,A,FI,DE          MASSE (I)
02,IO,3,A,FI,DE          INTENSITAET (I)
01,G1
02,M1,4,A,FI,DE
02,I1,3,A,FI,DE
01,G2
02,M2,4,A,FI,DE
02,I2,3,A,FI,DE
01,G3
02,M3,4,A,FI,DE
02,I3,3,A,FI,DE
01,G4
02,M4,4,A,FI,DE
02,I4,3,A,FI,DE
01,G5
02,M5,4,A,FI,DE
02,I5,3,A,FI,DE
01,G6
02,M6,4,A,FI,DE
02,I6,3,A,FI,DE
01,G7
02,M7,4,A,FI,DE
02,I7,3,A,FI,DE
01,G8
02,M8,4,A,FI,DE
02,I8,3,A,FI,DE
01,G9
02,M9,4,A,FI,DE
02,I9,3,A,FI,DE
01,SN,5,A,FI             SPEKTRENNUMMER
01,MF,30,A,NU            MOLEKULARFORMEL
01,NO,72,A,NU,MU        NOMENKLATUR
```

Jeder, ein bestimmtes Spektrum beschreibende Datensatz besteht aus 10 Datenfeldgruppen G0 bis G9 und 4 Dateneinzelfeldern MW, SN, MF und NO. Jede Datenfeldgruppe Gi besteht aus 2 Dateneinzelfeldern Mi und Ii und beinhaltet ein Masse + Intensitäts - paar entsprechend der Erläuterung unter Punkt 2 Datenreduktion. Alle als Descriptor (DE) bezeichneten Dateneinzelfelder können sowohl für die Zusammenstellung des Suchkriteriums, d.h. für die Eingabe (s.4.4 Anwendung) als auch für die Ausgabe herangezogen werden. Alle anderen sind nur für die Ausgabe bestimmt. Alle Dateneinzelfelder wurden als Zeichenkette (A) abgespeichert, wodurch das Anlegen und Arbeiten mit der Datenbank besonders einfach wird. Einige Felder wurden in fester Länge (3, 4 oder 5 Bytes / FI) abgespeichert, da eine automatische Nullwert- bzw. Leerzeichen - unterdrückung in ihrem Falle unsinnig ist. Diese Datenkompression (NU) ist nur sinnvoll bei den Einzelfeldern Molekularformel (MF) und Nomenklatur (NO), da sie oft überflüssige rechtsbündige Leerzeichen beinhalten. Zusätzlich bedeutet dies die physische Nichtabspeicherung bei reinen Leerzeichen- oder Nullwerten. Das Dateneinzelfeld Nomenklatur (NO) ist außerdem als Multiples Feld (MU) mit maximal 25 Einzelwerten von je 72 Zeichen Länge deklariert. Die aktuelle, tatsächliche Zahl von Einzelwerten pro Spektrum steht in dem 1 Byte langen Binärfeld NOC vor dem ersten Einzelwert. Näheres ist in den ADABAS-Handbüchern nachzulesen (s.6. Literaturhinweise).

Der ADAWAN-Lauf erzeugt unter dem DD-Namen DDRUCK den nachfolgenden Ausdruck:

1	01,MW,4,A,FI,DE	MOLEKULARGEWICHT
2	01,G0	GRUPPE (I)
3	02,M0,4,A,FI,DE	MASSE (I)
4	02,I0,3,A,FI,DE	INTENSITAET (I)
5	01,G1	
6	02,M1,4,A,FI,DE	
7	02,I1,3,A,FI,DE	
8	01,G2	
9	02,M2,4,A,FI,DE	
10	02,I2,3,A,FI,DE	
11	01,G3	
12	02,M3,4,A,FI,DE	
13	02,I3,3,A,FI,DE	
14	01,G4	
15	02,M4,4,A,FI,DE	
16	02,I4,3,A,FI,DE	
17	01,G5	
18	02,M5,4,A,FI,DE	
19	02,I5,3,A,FI,DE	
20	01,G6	
21	02,M6,4,A,FI,DE	
22	02,I6,3,A,FI,DE	
23	01,G7	
24	02,M7,4,A,FI,DE	
25	02,I7,3,A,FI,DE	
26	01,G8	
27	02,M8,4,A,FI,DE	
28	02,I8,3,A,FI,DE	

29 01,G9
 30 02,M9,4,A,FI,DE
 31 02,I9,3,A,FI,DE
 32 01,SN,5,A,FI
 33 01,MF,30,A,NU
 34 01,NO,72,A,NU,MU

SPEKTRENNUMMER
 MOLEKULARFORMEL
 NOMENKLATUR

NUMBER OF RECORDS READ	I	32,170
	I	
NUMBER OF INCORRECT RECORDS	I	0
	I	
NUMBER OF COMPRESSED RECORDS	I	32,170
	I	

	I	
NUMBER OF BYTES RAW DATA	I	8,270,396
	I	
NUMBER OF BYTES COMPRESSED DATA	I	6,788,752
	I	
COMPRESSION RATE (PERCENT)	I	17,9
	I	

NUMBER OF CYLINDERS NECESSARY IN DATA STORAGE

DEVICE TYPE	B U F F E R P E R C E N T A G E												
	I	5 %	I	10 %	I	15 %	I	20 %	I	25 %	I	30 %	I
	I		I		I		I		I		I		I
3340	I	75	I	79	I	83	I	89	I	94	I	101	I
2314	I	52	I	54	I	58	I	61	I	65	I	70	I
2305/2	I	43	I	45	I	48	I	51	I	54	I	58	I
3330	I	30	I	32	I	34	I	36	I	38	I	41	I
4580	I	56	I	59	I	62	I	66	I	71	I	76	I
	I		I		I		I		I		I		I

4 Interaktives Suchprogramm ADAMSS

4.1 CLIST-Prozeduren

4.1.1 Übersetzen und Linken

```
1 PROC 0
2 CONTROL PROMPT
3 FORT MSSUCHE.FORT /*OBJEKT-MODUL ERZEUGEN*/
4 ALLOC F(INPUT) DA(MSSUCHE.LOAD) SHR /*LOAD-DATEI ALLOKIEREN*/
5 WRITE PLEASE ENTER: INCLUDE INPUT(ADALOAD)
  /*ADABAS-LOAD-DATEIEN ALLOKIEREN DURCH EINFUEGEN DER STEUERKARTE*/
6 LINK (MSSUCHE.OBJ,*) PRINT(*) LOAD(MSSUCHE.LOAD(MSSUCHE))
  /*AUS OBJEKT-MODUL UND ADABAS-LOAD-MODULEN WIRD EIN NEUES MEMBER*/
  /*DES PDS MSSUCHE.LOAD MIT NAMEN -MSSUCHE- ERZEUGT          */
7 DELETE MSSUCHE.OBJ /*LOESCHEN DES OBJEKT-MODULS*/
8 FREE F(INPUT) /*MSSUCHE.LOAD FREIGEBEN*/
9 COMPRESS MSSUCHE.LOAD NOLIST
10 REDUCE MSSUCHE.LOAD
11 END
```

Die Erzeugung eines ausführbaren Lademoduls geschieht interaktiv mit der Prozedur ADALILO.CLIST. Dies erfolgt durch das TSO-Kommando

```
EX ADALILO ( ADABAS Link Load ).
```

Zunächst wird in Statement 3 eine Übersetzung des FORTRAN-Dialogprogramms durchgeführt bzw. das Objektmodul MSSUCHE.OBJ erzeugt. Danach wird durch einen LINK-Step aus dem Objektmodul und dem Member ADALOAD aus dem PDS MSSUCHE.LOAD, das alle ADABAS-Module enthält, das ausführbare Loadmodul MSSUCHE als neues Member des PDS erzeugt. Dazu fordert der LINKAGE EDITOR Kontrollstatements an. Was einzugeben ist, wird durch die Aufforderung in Statement 5 vorgegeben. Beendet wird die Eingabe für den LINKAGE EDITOR durch das Betätigen der ENTER-Taste. Das Objektmodul MSSUCHE.OBJ wird gelöscht, zuviel allokierte Spuren werden abschließend durch Kompression und Reduktion des PDS MSSUCHE.LOAD freigegeben.

Grundsätzlich ist die beschriebene Prozedur nach jeder Korrektur oder Erweiterung des FORTRAN-Dialogprogramms MSSUCHE.FORT zu starten, bevor, eine fehlerfreie Übersetzung vorausgesetzt, mit dem eigentlichen Dialog begonnen werden kann.

Beispiel:

(Kleinschreibung -> Eingabe
Großschreibung -> Ausgabe)

```
.  
.
READY
ex adalilo
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = MAIN
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = KRITER
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = SUCHEN
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = LESEN
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = PROTOK
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
G1 COMPILER ENTERED
SOURCE ANALYZED
PROGRAM NAME = INFO
* NO DIAGNOSTICS GENERATED
  *STATISTICS* NO DIAGNOSTICS THIS STEP -
PLEASE ENTER: INCLUDE INPUT(ADALOAD)
IKJ76080A ENTER CONTROL STATEMENTS-
include input(adaload)
  <ENTER-Taste betätigen>
IKJ76111I END OF CONTROL STATEMENTS

F64-LEVEL LINKAGE EDITOR OPTIONS SPEZIFIED NONE
      DEFAULT OPTION(S) USED - SIZE=(196608,65536)
****MSSUCHE NOW REPLACED IN DATA SET
AUTHORIZATION CODE IS 0.

IEBCOPY RETURN CODE 0
READY
.  
.
.
```

4.1.2 Ausführen

```
1 PROC 0 PRINT(*)
2 CONTROL NOFLUSH NOMSG
3 DELETE ($.WORK,$.ASM)
4 ALLOC F(DDPRINT) DA(*)
5 ATTR A DSORG(DA) BLKSIZE(3024) RECFM(F)
6 ALLOC F(DDWORKR4) DA($.WORK) NEW SPACE(2) CYLINDERS USING(A)-
7 VOLUME(ADABAS) UNIT(DISK)
8 FREE ATTR(A)
9 ATTR A DSORG(PS) BLKSIZE(80) RECFM(F)
10 ALLOC F(DDKARTE) DA($.ASM) NEW SPACE(1) TRACKS USING(A)
11 FREE ATTR(A)
12 ALLOC F(DDPLATTE) DA($.WORK) SHR
13 ALLOC F(DDDRUCK) DA(*)
14 OPENFILE DDKARTE OUTPUT
15 SET &DDKARTE=&STR( WORK 3350 2)
16 PUTFILE DDKARTE
17 CLOSFIE DDKARTE
18 CALL 'TSOSYS.ADABAS.LOAD(ADAFRM) '
19 FREE F(DDPLATTE,DDDRUCK,DDKARTE)
20 DELETE $.ASM
21 FREE F(DDASSOR4,DDDATAR4,DDPRINT,DDWORKR4,JOB,SYSPRINT)
22 ALLOC F(SYSPRINT) DA(*)
23 DEL ($.JOB.CNTL,$.DRF)
24 ALLOC F(DDASSOR4) DA('TSOSYS.ADA.ASSO') SHR
25 ALLOC F(DDDATAR4) DA('TSOSYS.ADA.DATA') SHR
26 ALLOC F(DDPRINT) DUMMY
27 ALLOC F(DDWORKR4) DA($.WORK) OLD
28 FREE F(FT20F001)
29 ALLOC F(FT20F001) DA(MSSUCHE.DATA) SHR
30 FREE F(FT30F001)
31 ALLOC F(FT30F001) DA(MSPRINT.DATA) SHR
32 ATTN OFF
33 CALL 'TS0610.MSSUCHE.LOAD(MSSUCHE) '
34 OPENFILE FT30F001
35 GETFILE FT30F001
36 SET &Z1=&SUBSTR(1:6,&FT30F001)
37 CLOSFIE FT30F001
38 IF &Z1=0 THEN GOTO LAB1
39 SUBMIT PP64B.CNTL(ADAPRINT)
40 WRITE *** AUSGEWAHLTE SPEKTREN WERDEN GEDRUCKT / JOB HCH61OMS ***
41 LAB1:DELETE $.WORK
42 SYSPRINT
43 ATTN DO
44 WRITE WEGEN ATTENTION WURDEN MOEGLICHERWEISE NICHT ALLE
45 WRITE TEMPORAEREN ADABAS-DATASETS GELOESCHT. SIE BEGINNEN
46 WRITE MIT $. BEACHTEN SIE SPACE-CONTROL!!!
47 DELETE $.WORK
48 SYSPRINT
49 EXIT
50 END
```

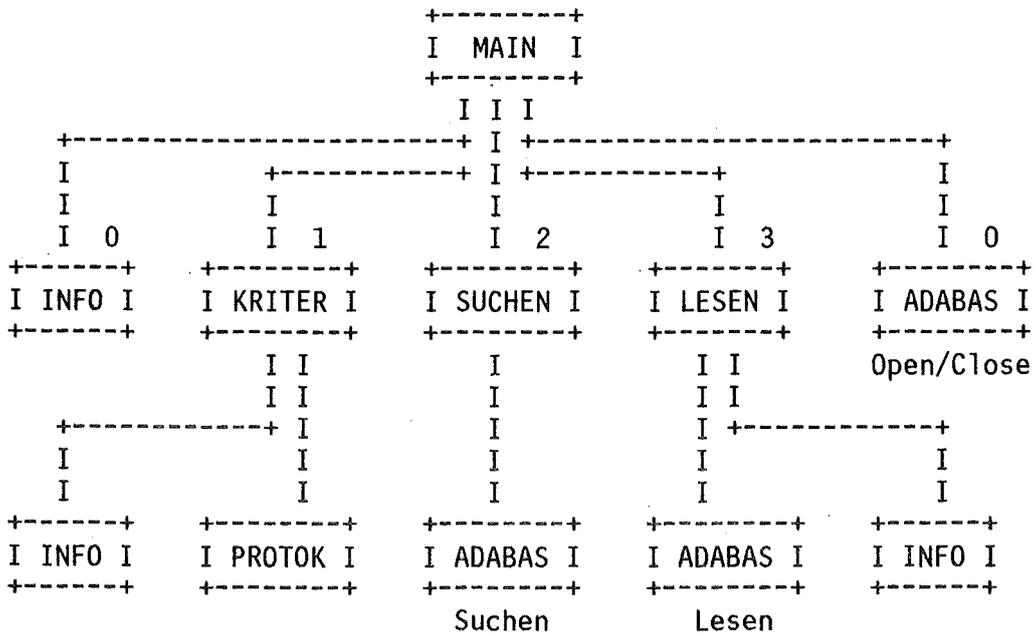
Der überwiegende, nicht näher erläuterte Teil der Prozedur wird benötigt, die Verbindung zu den notwendigen ADABAS-Dateien herzustellen. Vor dem Aufruf des Dialogprogramms in Statement 33 werden die für die Ausgabe notwendigen TSO-Dateien MSSUCHE.DATA und MSPRINT.DATA allokiert. Die erstere dient zur Aufnahme von Spektreninformationen, die sich der Anwender nach Abschluß einer erfolgreichen Suche nach einem speziellen Schlüssel ausgewählt hat und für spätere Zwecke bereithalten will. Die zweite dient zur Aufnahme derjenigen Spektrennummern, deren komplette Originaldaten aus der MS-Bibliothek auf Band der in Statement 39 abgesetzte Background-Job über einen Schnelldrucker auflistet. Der Inhalt der Datei MSPRINT.DATA wird anschließend gelöscht. Auf Grund einiger Sonderzeichen in den Spektrennomenklaturen und vorgegebener Zeichensätze der verfügbaren Druckerketten wird in diesem Job das ASSEMBLER-Programm CODETRAN.ASM zur Übersetzung von EBCDIC nach TSO anhand einer speziell zu diesem Zweck angelegten Konversionstabelle eingeschaltet. Abschließend sei noch darauf hingewiesen, daß bei abnormalem Ende des Dialogs temporäre Hilfsdateien unter Umständen nicht gelöscht werden. In diesem Falle ist über das TSO-Kommando SPACE ALL auf noch existente Hilfsdateien zu prüfen bzw. sind diesselben zu löschen. Durch das TSO-Kommando

EX ADAMSS (ADABAS Massen Spektren Suche)

wird die Prozedur gestartet.

4.2 Funktioneller Zusammenhang

Das im folgenden in seiner strukturellen Zusammensetzung und seinem funktionellen Ablauf beschriebene FOREGROUND-Programm arbeitet zum Zwecke der einfachen Anwendung mit Menutechnik. Dabei hat der Anwender nur eine oder eine Kombination der angebotenen Möglichkeiten auszuwählen. Alle Menues enthalten je eine Kennziffer zur Verfügbarmachung einer Kurzinformation über die Anwendung des Dialogprogramms, zur Wiederholung des Menues und zur sofortigen Beendigung des Dialogs. Es setzt sich einschließlich dem Programmsystem ADABAS aus insgesamt 7 Programmen zusammen, die nachfolgend in ihrer gegenseitigen Abhängigkeit aufgezeigt sind:



Nach dem Start des Hauptprogramms MAIN durch Ausführung der CLIST-Prozedur ADAMSS erfolgt ein einmaliges OPEN auf die notwendigen ADABAS-Dateien (Level 0), danach bewegt sich der Gesamt Ablauf zwischen den Programmen KRITER (Level 1), SUCHEN (Level 2) und bei Bedarf LESEN (Level 3) in der angegebenen Rangfolge. In die Programme SUCHEN und LESEN eingebunden sind die Aufrufe von ADABAS zum Suchen und Lesen. Sie entziehen sich damit dem unmittelbaren Einfluß des Anwenders während des Dialogs. Demgegenüber bleibt ihm das Aufrufen der Programme INFO und PROTOK hinsichtlich Zeitpunkt und Häufigkeit freigestellt. Ebenso zwangsläufig wie das OPEN am Anfang erfolgt nach Beendigung des Dialogs ein CLOSE auf alle ADABAS-Dateien.

4.3 ADABAS-Kontrollvariable

Die wichtigsten für die ADABAS-Aufrufe benötigten Kontrollvariablen sind global. Sie werden im folgenden kurz vorgestellt und hinsichtlich ihrer Bedeutung, Größe und ihres Wertes erläutert:

Kontrollblock	CTLBLK		Steuerblock
Formatpuffer	FORBUF	--+	
Satzpuffer	RECBUF	I	
Suchpuffer	SUBUF	I >	Steuerpuffer
Wertepuffer	WEBUF	I	
ISN-Puffer	ISBUF	--+	

Steuerblock und Steuerpuffer bilden zusammen den für jeden Datenbankbefehl notwendigen Verständigungsbereich. Der Steuerblock ist ein fester, formatisierter Bereich von 80 Bytes, die hinsichtlich ihrer Verwendung einer für alle Datenbankzugriffe unveränderlichen Einteilung unterliegen. Die 5 verschiedenen Steuerpuffer werden von den einzelnen Datenbankbefehlen unterschiedlich verwendet, ihre Lage im Anwenderprogramm ist frei wählbar. Ihre Adressen müssen im ADABAS-Aufruf immer in der oben genannten Reihenfolge erscheinen. Ein nicht verwendeter Puffer kann im Aufruf als DUMMY-Variable erscheinen oder entfallen, wenn es sich um das letzte Argument handelt. Der Steuerblock muß als Argument immer vorhanden sein.

Beispiele für einen ADABAS-Aufruf:

```
CALL ADABAS(CTLBLK, FORBUF, RECBUF, SUBUF, WEBUF, ISBUF)
CALL ADABAS(CTLBLK, DUMMY, RECBUF)
CALL ADABAS(CTLBLK)
```

Die beiden folgenden Seiten zeigen die für den Dialog wesentlichen, vor jedem Datenbankzugriff neu zu initialisierenden Felder des Steuerblocks sowie die Steuerpuffer bezüglich Anwendung und Größe.

FORBUF(51) Logical*1

Der Formatpuffer beschreibt das Format, in dem die Information eines gefundenen Datensatzes im Satzpuffer abgelegt wird. Das Format ist ohne Rücksicht auf besondere Wünsche des Anwenders so ausgelegt, daß der gesamte Datensatz entsprechend der Datenbankdefinition (s.3.1 Datenbankbeschreibung) im Satzpuffer

RECBUF(1910) Logical*1

abgelegt werden kann. Im Formatpuffer sind alle Felder, die über eine EQUIVALENCE-Anweisung gezielt angesprochen werden können, mit eventuellen Format- und Längenangaben und ihrer Reihenfolge angegeben:

MW,G0,G1,G2,G3,G4,G5,G6,G7,G8,G9,SN,MF,NOC,N01-25,.

SUBUF(72) Logical*1

WEBUF(72) "

Der Suchpuffer wird für die Formulierung des Suchkriteriums und die Formatbeschreibung der Werte im Wertepuffer verwendet. Deshalb werden beide Puffer grundsätzlich zusammen angesprochen und verwendet. Die jeweils aktuelle Anzahl der gespeicherten Zeichen steht in SBL und VBL. Testläufe haben die maximale Dimension von 72 Bytes als ausreichend bestätigt.

ISBUF(2500) Integer*4

Der ISN-Puffer dient zur Aufnahme der auf Grund einer Suchanfrage gefundenen internen Datensatznummern. Eine Suchanfrage, die mehr als 2500 gefundene Sätze zur Folge hat, wird verworfen. Anhand dieser ISN's nun werden die entsprechenden Datensätze sequentiell gelesen und einzeln im Satzpuffer abgelegt. Von dort läßt sich die Gesamt- oder gezielte Teilinformation ausgeben.

4.4 Anwendung und Ablauf

Grundsätzlich sei vorab noch einmal die Tatsache festgehalten, daß alle verwendeten Menues dem Anwender nach dem ausgegebenen Fragezeichen (?) nur die Eingabe einer einzigen oder einer Kombination der angebotenen Kennziffern gestattet. Alle anderen haben die Wiederholung des Menues zur Folge. Alle Menues enthalten jeweils eine Kennziffer zur Ausgabe von Kurz - informationen über die Anwendung (Unterprogramm INFO), zur sofortigen Beendigung des Dialogprogramms sowie zur vollständigen Neuausgabe eines am unteren Bildschirmrand unvollständigen Menues. Auf Grund der Nichtprogrammierbarkeit des Bildschirms erscheint dazu, wie auch bei Beginn einer Datenausgabe, die Nachricht:

*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> ***

Wird das Löschen des Bildschirms unterlassen, wird die Ausgabe nach Betätigung der ENTER/RETURN-Taste unmittelbar an der CURSOR-Position fortgesetzt. Ist der Bildschirm vollständig beschrieben, erscheint am unteren Bildschirmrand in Form einer Sternchenfolge (***) der Hinweis, daß die Ausgabe noch nicht abgeschlossen ist. In diesem Fall ist nur das Betätigen der ENTER/RETURN-Taste erlaubt. Wird an dieser Stelle irrtümlich ein beliebiges Zeichen eingegeben, erfolgt der sofortige Abbruch des Dialogprogramms.

Bei fehlerhaften ADABAS-Aufrufen erscheint grundsätzlich eine entsprechende Nachricht mit Angabe des Befehls- und Antwortcodes. Danach, wie auch bei regulärem Ende des Dialogs, erfolgt ein CLOSE auf alle ADABAS-Dateien und die Beendigung des Programms, dokumentiert durch die Nachricht:

+++ MS-SUCHE ENDE +++

Nach dem Start durch das TSO-Kommando

EX ADAMSS

erscheint auf dem Bildschirm als erstes die Bestätigung für die korrekte Zuschaltung der Datenbank:

WORK 3350 2
ADAFRM NORMAL END

Unmittelbar nach der umseitigen Bestätigung bietet das Haupt -
programm MAIN das 1. Menue an:

+++ MS-SUCHE BEGINN +++

```
-----  
I 1      INFO                I  
I 2      DIALOG START        I  
I 3      DIALOG STOP         I  
I 4      MENUE                I  
-----
```

AUSGEWAELHTE KENNZIFFER:
?

Es bietet dem Anwender die Möglichkeiten, sich Kurzinformationen über die Anwendungsbedingungen zeigen zu lassen, den Dialog zu beginnen oder zu beenden sowie das Menue zu wiederholen. Nach Eingabe der Kennziffer 2 erfolgt durch den ersten ADABAS-Aufruf ein OPEN auf die Datenbank. Danach erfolgt sofort der Sprung in das Unterprogramm KRITER, das das folgende 2. Menue anbietet:

+++++ SUCHEN +++++

```
-----  
I 1      INFO                I  
I 2      NEUE SUCHE          I  
I 3      ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I  
I 4      ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I  
I 5      ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I  
I 6      ENDE SUCHE / AUSGABE I  
I 7      PROTOKOLL           I  
I 8      DIALOG STOP         I  
I 9      MENUE                I  
-----
```

AUSGEWAELHTE KENNZIFFER:
?

Kennziffer 2 verlangt unter der Vorgabe

*** GEBEN SIE EIN NEUES SUCHKRITERIUM EIN --->

<

die Eingabe eines neuen Suchkriteriums. Dies wird immer dann der Fall sein, wenn die vorausgegangene Suchanfrage für den Anwender erfolgreich oder ergebnislos abgeschlossen wurde.

Kennziffer 3 erwartet unter der Vorgabe

*** FUEGEN SIE EIN NEUES EINZELKRITERIUM HINZU --->

<

die Erweiterung eines vorausgegangenen Suchkriteriums um ein zusätzliches Einzelkriterium mittels logischem Operator UND (+). Dies ist dann sinnvoll, wenn das vorausgegangene Suchkriterium ein für die Ausgabe zu umfangreiches Ergebnis, d.h. zu viele gefundene Datensätze geliefert hat.

Kennziffer 4 erwartet unter der Vorgabe

*** ERSETZEN SIE DAS LETZTE EINZELKRITERIUM --->

<

die Eingabe eines Einzelkriteriums, das ein vor der letzten Suchanfrage unter der Kennziffer 3 hinzugefügtes Einzelkriterium ersetzen soll.

Kennziffer 5 veranlaßt ohne Bildschirmausgabe die Streichung des vor der letzten Suchanfrage hinzugefügten Einzelkriteriums.

Kennziffer 1,8 und 9 (siehe Erklärung zum 1. Menue, Seite 20)

Entspricht ein unter den Kennziffern 2-5 eingegebenes Such- oder Einzelkriterium nicht den unter 4.4.1 beschriebenen Regeln, so wird der Anwender durch die Nachricht

*** FALSCH EINGABE, WIEDERHOLEN SIE ***

darauf hingewiesen und kann die Eingabe nach der schon einmal erfolgten Bildschirmvorgabe wiederholen. Von allen Kriterien oder Kriterienmanipulationen wird fortlaufend Buch geführt. Dabei werden die formulierten Such- und/oder Einzelkriterien und die zugehörigen Kennziffern in der Reihenfolge ihrer Eingabe notiert. Bei mehr als 20 Notierungen wird der älteste Eintrag gelöscht und der neueste aufgenommen. Dieses Protokoll kann jederzeit durch Eingabe der Kennziffer 7, die einen Sprung ins Unterprogramm PROTOK bewirkt, eingesehen werden.

Die Kennziffern 2-5 bewirken alle einen sofortigen Rücksprung ins Hauptprogramm MAIN und von dort den Sprung ins Unterprogramm SUCHEN. Je nach Erfolg enthält der Anwender die entsprechende Nachricht:

```
=====
I                                     I
I SCHADE, KEINE SPEKTREN GEFUNDEN   I
I                                     I
=====
I                                     I
I                                     I
I                                     I
=====
```

Außerordentlicher
Rücksprung aus dem
Unterprogramm SUCHEN -
RETURN 1

```
=====
I                                     I
I MEHR ALS 2500 SPEKTREN GEFUNDEN   I
I                                     I
=====
I                                     I
I                                     I
I                                     I
=====
```

Außerordentlicher
Rücksprung aus dem
Unterprogramm SUCHEN -
RETURN 2

```
=====
I                                     I
I TOLL, 1371 SPEKTREN GEFUNDEN     I
I                                     I
=====
I                                     I
I                                     I
I                                     I
=====
```

Unterprogramm SUCHEN -
Ordentlicher
Rücksprung
RETURN

In allen Fällen erfolgt sofort der erneute Sprung ins Unterprogramm KRITER mit Ausgabe des 2. Menues. Nun bleibt es dem Anwender überlaßen, das Ergebnis der Suchanfrage durch weitere Manipulationen des Suchkriteriums zu verbessern, oder aber, im Falle eines zufriedenstellenden Ergebnises, die Suche zwecks Spektrenausgabe mit der Kennziffer 6 zu beenden. Dies bedeutet einen außerordentlichen Rücksprung RETURN 1 ins Hauptprogramm MAIN und von dort den Sprung ins Unterprogramm LESEN. Dort wird als erstes das 3. Menue angeboten:

+++++ LESEN +++++

- ```

I 0 INFO I
I-----I
I 1 SPEKTRENNUMMER I
I 2 MOLEKULARGEWICHT I
I 3 MOLEKULARFORMEL I
I 4 10 INTENSIVSTEN MASEN + INTENSITAETEN I
I 5 NOMENKLATUREN I
I-----I
I 6 BILDSCHIRM (TEMPORAER) + EVTL. DRUCKER I
I 7 PLATTE (PERMANENT) + EVTL. DRUCKER I
I 8 BILDSCHIRM + PLATTE + EVTL. DRUCKER I
I-----I
I 9 DRUCKER (BACKGROUND-JOB) I
I-----I
I 10 DIALOG STOP I
I-----I
I 11 MENUE I
I-----I
```

AUSGEWAELTE KENNZIFFERN-KOMBINATION:

?

Hier hat nun der Anwender die Möglichkeit, sich die Ausgabe aller gefundenen Datensätze durch Auswahl bestimmter, aufsteigend geordneter Kombinationen der Kennziffern 1-5 plus die Kennziffer 6, 7 oder 8 oder der Kennziffer 9 (die Kennziffern 0, 10 und 11 haben die schon bekannte Sonderbedeutung) selbst zusammenzustellen.

Beispiele:

123456            Ausgabe der Spektrennummer, des Molekulargewichts, der Molekularformel, der 10 intensivsten Massen und zugehöriger Intensitäten sowie der Nomenklatur auf Bildschirm.

247                Ausgabe des Molekulargewichts, der 10 intensivsten Massen und zugehöriger Intensitäten auf Platte, d.h. TSO-Datei MSSUCHE.DATA (s.4.1.2 Ausführen).

158                Ausgabe der Spektrennummer und der Nomenklatur auf Bildschirm und Platte.

9                  Ausgabe aller gefundenen Spektren in ihrer Originalfassung von Band. Dazu erscheint nach Abschluß des Dialogs die Nachricht:

\*\*\* AUSGEWAHLTE SPEKTREN WERDEN GEDRUCKT / JOB HCH610MS \*\*\*

Nach der Ausgabe jedes einzelnen Spektrums unter den Kennziffern 6, 7 und 8 wird der Anwender nach der Ausgabe der Originalinformation von Band gefragt:

\*\*\* ANFERTIGUNG EINER DRUCKERLISTE ? (-JA/J- ODER -NEIN/N-) \*\*\*

Wird mindestens 1 derartige Frage mit JA beantwortet, erfolgt dieselbe Aktion wie unter Kennziffer 9.

Nach Abschluß der Ausgabe erfolgt der ordentliche Rücksprung ins Hauptprogramm MAIN und von dort der erneute Sprung ins Unterprogramm KRITER. Der Zyklus

K r i t e r i u m            -            S u c h e n            -            L e s e n

wiederholt sich, bis der Dialog durch DIALOG STOP beendet wird.

#### 4.4.1 Formulierung des Suchkriteriums

Ein Suchkriterium ist nach folgenden Regeln zu erstellen:

- Ein Suchkriterium ist als geschlossene Zeichenkette von maximal 72 Zeichen Länge einzugeben. Der erlaubte Bereich ist bei der Anfrage durch den Begrenzer < vorgegeben. Das letzte Zeichen muß immer ein Punkt ( . ) sein.
- Ein Suchkriterium besteht aus mindestens 1 Einzelkriterium, das sich seinerseits aus einem der erlaubten Suchbegriffe

MW, M0 - M9, I0 - I9

und einem durch ein Gleichheitszeichen ( = ) verknüpften Suchwert zusammensetzt.

Die Variablen haben entsprechend der Datenbankbeschreibung die folgende Bedeutung (s. Pkt. 2 Datenreduktion):

|         |     |                                                                             |
|---------|-----|-----------------------------------------------------------------------------|
| MW      | --- | Molekulargewicht                                                            |
| I0 - I9 | --- | die 10 größten, absteigend sortierten,<br>auf 100 % normierten Intensitäten |
| M0 - M9 | --- | die zugehörigen Massen                                                      |

Dabei sind als Suchwerte erlaubt:

|                 |                        |       |
|-----------------|------------------------|-------|
| für MW, M0 - M9 | max. 4 - stellige Zahl | ≥ 45  |
| für I0 - I9     | max. 3 - stellige Zahl | ≤ 100 |

Beispiele:

MW=240. , I2=78. , M3=4132. , I0=100.

- Einzelkriterien sind durch die nachfolgend aufgeführten Operatoren zu verknüpfen:

+ Logische UND - Beziehung zweier Einzelkriterien.

I5=70+M2=66.

(6.-größte Intensität = 70 UND Masse der 3.-größten Intensität = 66)

SUBUF: I5,D,M2,.  
WEBUF: 70 22

SBL: 9  
VBL: 7

/ Logische ODER - Beziehung zweier Einzelkriterien bzw. Suchwerte, die sich auf einen Suchbegriff beziehen.

M1=150/M1=200. oder M1=150/200.  
(Masse der 2.-größten Intensität = 150 ODER 200)

SUBUF: M1,0,M1,. SBL: 9  
WEBUF: 150 200 VBL: 8

: VON-BIS - Beziehung zweier Einzelkriterien bzw. Suchwerte, die sich auf einen Suchbegriff beziehen.

I2=75:I2=100. oder I2=75:100.  
(75 ≤ 3.-größte Intensität ≤ 100)

SUBUF: I2,S,I2,. SBL: 9  
WEBUF: 75100 VBL: 6

# ABER-NICHT - Ausschluß eines bestimmten Suchwertes oder Suchwertebereichs innerhalb eines vorher durch die VON-BIS-Beziehung definierten Suchwertebereichs.

M8=45:M8=60#M8=50. oder M8=45:60#50.  
(45 ≤ Masse der 9.-größten Intensität ≤ 60  
UND NICHT Masse der 9.-größten Intensität = 50)

I5=35:I5=80#I5=51:I5=60. oder I5=35:80#51:60.  
(35 ≤ 6.-größte Intensität ≤ 80 UND NICHT  
51 ≤ 6.-größte Intensität ≤ 60)

SUBUF: M8,S,M8,N,M8,. SBL: 14  
WEBUF: 45 60 50 VBL: 12

SUBUF: M8,S,M8,N,M8,S,M8,. SBL: 19  
WEBUF: 35 80 51 60 VBL: 16

### 4.5 Dialogbeispiel

Dieses Beispiel zeigt den prinzipiellen Ablauf eines Dialogs unter TSO. Zum besseren Verständnis sind die Anwenderaktionen durch einen Pfeil, durch Kleinschreibung und nähere Erläuterungen besonders hervorgehoben.

--> logon hch610/marathon pr(f) <-----  
I Eröffnung der TSO-Sitzung I

IKJ56455I HCH610 LOGON IN PROGRESS AT 15.33.08 ON OKTOBER 1, 1981  
\*\*\*\*\* MVS-SE Release 3.8 \*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\* DAS SYSTEM LAEUFT IM MODUS TAG \*\*\*\*\*  
READY

--> ex adamss <-----  
I Start der Dialogprozedur I

WORK 3350 2  
ADAFRM NORMAL END  
+++ MS-SUCHE BEGINN +++  
-----  
I 1 INFO I  
I 2 DIALOG START I  
I 3 DIALOG STOP I  
I 4 MENUE I  
-----

AUSGEWAELHTE KENNZIFFER:  
?

--> 2 <-----  
I Start des Dialogs I

+++++ SUCHEN +++++  
-----  
I 1 INFO I  
I 2 NEUE SUCHE I  
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I  
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I  
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I  
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I  
I 7 PROTOKOLL I  
I 8 DIALOG STOP I  
I 9 MENUE I  
-----

AUSGEWAELHTE KENNZIFFER:  
?

--> 2 <-----  
I Beginn einer neuen Suche, I  
I d.h. neues Kriterium I

\*\*\* GEBEN SIE EIN NEUES SUCHKRITERIUM EIN -->

--> mw=75;110. <-----  
I 75 ≤ Molekulargewicht des I  
I gesuchten Spektr. ≤ 110 I  
I ; kein zulässiger Operator I

\*\*\* FALSCH EINGABE, WIEDERHOLEN SIE \*\*\*  
\*\*\* GEBEN SIE EIN NEUES SUCHKRITERIUM EIN -->

--> mw=75:100.

```

<-----
I 75 ≤ Molekulargewicht des I
I ges. Spektr. ≤ 100 I

```

```

=====
I I
I TOLL, 917 SPEKTREN GEFUNDEN I
I I
=====

```

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 3

```

<-----
I Erweiterung des Suchkrit. I
I zwecks Red. der Zahl der I
I gefundenen Spektren I

```

\*\*\* FUEGEN SIE EIN NEUES EINZELKRITERIUM HINZU -->

--> il=30:50.

```

<-----
I 30 ≤ 2.-größte Int. ≤ 50 I

```

```

=====
I I
I TOLL, 232 SPEKTREN GEFUNDEN I
I I
=====

```

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 4 <-----  
I Ersetzen des letzten I  
I Einzelkrit. zwecks Red. I  
I der Zahl der gef. Spektren I  
-----

\*\*\* ERSETZEN SIE DAS LETZTE EINZELKRITERIUM -->

--> i1=30:35. <-----  
I 30 ≤ 2.-größte Int. ≤ 35 I  
-----

=====  
I I  
I TOLL, 83 SPEKTREN GEFUNDEN I  
I I  
=====

+++++ SUCHEN +++++

-----  
I 1 INFO I  
I 2 NEUE SUCHE I  
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I  
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I  
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I  
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I  
I 7 PROTOKOLL I  
I 8 DIALOG STOP I  
I 9 MENUE I  
-----

AUSGEWAELTE KENNZIFFER:  
?

--> 4 <-----  
I Ersetzen des letzten I  
I Einzelkrit. zwecks Red. I  
I der Zahl der gef. Spektren I  
-----

\*\*\* ERSETZEN SIE DAS LETZTE EINZELKRITERIUM -->

--> i1=30:32. <-----  
I 30 ≤ 2.-größte Int. ≤ 32 I  
-----

=====  
I I  
I TOLL, 45 SPEKTREN GEFUNDEN I  
I I  
=====

+++++ SUCHEN +++++

- I 1 INFO I
- I 2 NEUE SUCHE I
- I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
- I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
- I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
- I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
- I 7 PROTOKOLL I
- I 8 DIALOG STOP I
- I 9 MENUE I

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 3

<-----  
I Erweiterung des Suchkrit. I  
I zwecks Red. der Zahl der I  
I gefundenen Spektren I  
-----

\*\*\* FUEGEN SIE EIN NEUES EINZELKRITERIUM HINZU -->

--> m0=45/85.

<-----  
I Masse der größten Int. I  
I = 45 ODER 85 I  
-----

=====  
I I  
I TOLL, 2 SPEKTREN GEFUNDEN I  
I I  
=====

+++++ SUCHEN +++++

- I 1 INFO I
- I 2 NEUE SUCHE I
- I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
- I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
- I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
- I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
- I 7 PROTOKOLL I
- I 8 DIALOG STOP I
- I 9 MENUE I

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 3

<-----  
I Erweiterung des Suchkrit. I  
I zwecks Red. der Zahl der I  
I gefundenen Spektren I  
-----

\*\*\* FUEGEN SIE EIN NEUES EINZELKRITERIUM HINZU -->

<

--> m1=25:28#26.

```

I 25 ≤ Masse der 2.-größten I
I ≤ 28 ABER NICHT 26 I

```

```

=====
I I
I SCHADE, KEINE SPEKTREN GEFUNDEN I
I I
=====

```

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 5

```

I Löschen des letzten I
I Einzelkrit., da keine I
I Verbesserung im Ergebnis I

```

```

=====
I I
I TOLL, 2 SPEKTREN GEFUNDEN I
I I
=====

```

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 6

```

I Ausgabe, da Ergebnis I
I zufriedenstellend I

```

+++++ LESEN +++++

|      |                                        |   |
|------|----------------------------------------|---|
| I 0  | INFO                                   | I |
| I 1  | SPEKTRENNUMMER                         | I |
| I 2  | MOLEKULARGEWICHT                       | I |
| I 3  | MOLEKULARFORMEL                        | I |
| I 4  | 10 INTENSIVSTEN MASSES + INTENSITAETEN | I |
| I 5  | NOMENKLATUREN                          | I |
| I 6  | BILDSCHIRM (TEMPORAER) + EVTL. DRUCKER | I |
| I 7  | PLATTE (PERMANENT) + EVTL. DRUCKER     | I |
| I 8  | BILDSCHIRM + PLATTE + EVTL. DRUCKER    | I |
| I 9  | DRUCKER (BACKGROUND-JOB)               | I |
| I 10 | DIALOG STOP                            | I |
| I 11 | MENUE                                  | I |

AUSGEWAELTE KENNZIFFERNKOMBINATION:

?

--> 11

<-----  
I Wiederholung des Menues, I  
I da am unteren Bildschirm - I  
I rand unvollständig I

\*\*\* DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> \*\*\*

+++++ LESEN +++++

|      |                                        |   |
|------|----------------------------------------|---|
| I 0  | INFO                                   | I |
| I 1  | SPEKTRENNUMMER                         | I |
| I 2  | MOLEKULARGEWICHT                       | I |
| I 3  | MOLEKULARFORMEL                        | I |
| I 4  | 10 INTENSIVSTEN MASSES + INTENSITAETEN | I |
| I 5  | NOMENKLATUREN                          | I |
| I 6  | BILDSCHIRM (TEMPORAER) + EVTL. DRUCKER | I |
| I 7  | PLATTE (PERMANENT) + EVTL. DRUCKER     | I |
| I 8  | BILDSCHIRM + PLATTE + EVTL. DRUCKER    | I |
| I 9  | DRUCKER (BACKGROUND-JOB)               | I |
| I 10 | DIALOG STOP                            | I |
| I 11 | MENUE                                  | I |

AUSGEWAELTE KENNZIFFERNKOMBINATION:

?

--> 23458

```

I Gewünschte Ausgabe von I
I Molekulargewicht, I
I Molekularformel, I
I Masse/Intensitäts-Paare, I
I und Nomenklaturen I

```

\*\*\* DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> \*\*\*

===== BEGINN DER AUSGABE =====

```

LAUFENDE NUMMER : 1
MOLEKULARGEWICHT : 78
MOLEKULARFORMEL : CH3NO2.H3N
10 INTENSIVSTEN M/I: 45 46 0 0 0 0 0 0 0 0
 100 30 0 0 0 0 0 0 0 0

```

```

NOMENKLATUREN :
Carbamic acid, monoammonium salt (8CI9CI) $$ Ammonium carbamate $$
Carbamic acid, ammonium salt

```

\*\*\* ANFERTIGUNG EINER DRUCKERLISTE ? (-JA/J- ODER -NEIN/N-) \*\*\*

--> n

```

I Eine Ausgabe des gesamten I
I Originalspektr. von Band I
I wird nicht gewünscht I

```

```

LAUFENDE NUMMER : 2
MOLEKULARGEWICHT : 100
MOLEKULARFORMEL : CH3F3Si
10 INTENSIVSTEN M/I: 85 81 47 100 80 66 86 99 87 82
 100 30 19 14 12 6 5 3 3 2

```

```

NOMENKLATUREN :
Silane, trifluoromethyl- (8CI9CI) $$ Methyltrifluorosilane $$ Sili
con carbide fluoride hydride (SiCF3H3) $$ Trifluoromethylsilane

```

\*\*\* ANFERTIGUNG EINER DRUCKERLISTE ? (-JA/J- ODER -NEIN/N-) \*\*\*

--> j

```

I Eine Ausgabe des gesamten I
I Originalspektr. von Band I
I wird gewünscht I

```

===== ENDE DER AUSGABE =====

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:  
?

--> 7

```

I Protokoll der letzten 20 I
I Suchkriterien I

```

\*\*\* DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> \*\*\*  
 SUCHKRITERIEN-PROTOKOLL MIT MENUE-KENNZIFFERN:

```

2 *** FALSCH EINGABE ***
2 Mw=75:100.
3 Mw=75:100+I1=30:50.
4 Mw=75:100+I1=30:35.
4 Mw=75:100+I1=30:32.
3 Mw=75:100+I1=30:32+M0=45/85.
3 Mw=75:100+I1=30:32+M0=45/85+M1=25:28#26.
5 Mw=75:100+I1=30:32+M0=45/85.

```

0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0  
0

+++++ SUCHEN +++++

```

I 1 INFO I
I 2 NEUE SUCHE I
I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I
I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I
I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I
I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I
I 7 PROTOKOLL I
I 8 DIALOG STOP I
I 9 MENUE I

```

AUSGEWAHLTE KENNZIFFER:

?

--> 8

```

I Ende des Dialogs/Ausgabe I
I des 2. Spektrums in seiner I
I Originalform von Band I
I (Antwort -j- nach dem I
I 2. Spektr. / Seite 32) I

```

+++ MS-SUCHE ENDE +++

\*\*\* AUSGEWAHLTE SPEKTREN WERDEN GEDRUCKT / JOB HCH610MS \*\*\*

READY

Ausgabeliste des BACKGROUND-Jobs:

AUSZUG AUS DER NSRDS-DATENBANK/USA  
 ZUM ADAMSS-LAUF VOM: 01.10.81/16.23.37  
 -----

|                         |                               |                               |
|-------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| LAENGE DES REKORDS: 126 | SPEKTRUM-NUMMER: 1089         | CAS-NUMMER: 373740            |
| EPA-NUMMER: 1131        | MOLEKULARGEWICHT: 100         | REINHEIT: 0.0 %               |
| ZAHL DER PEAKS: 50      | LAENGE DER MOLEKULARFORMEL: 7 | LAENGE DER NOMENKLATUREN: 140 |

MOLEKULARFORMEL: CH3F3Si

NOMENKLATUREN:

Silane, trifluoromethyl- (8CI9CI)    \$\$ Methyltrifluorosilane    \$\$ Silicon carbide fluoride hydride (SiCF3H)  
 3)    \$\$ Trifluoromethylsilane

MASSEN/INTENSITAETEN:

|       |        |       |       |      |        |      |        |      |       |       |        |
|-------|--------|-------|-------|------|--------|------|--------|------|-------|-------|--------|
| 2.0   | 23.0   | 12.0  | 138.0 | 13.0 | 222.0  | 14.0 | 401.0  | 15.0 | 982.0 | 16.0  | 23.0   |
| 19.0  | 27.0   | 20.0  | 8.0   | 26.0 | 2.0    | 27.0 | 3.0    | 28.0 | 289.0 | 29.0  | 26.0   |
| 30.0  | 6.0    | 31.0  | 61.0  | 32.0 | 91.0   | 33.0 | 920.0  | 34.0 | 11.0  | 35.0  | 5.0    |
| 37.0  | 2.0    | 38.0  | 1.0   | 40.0 | 22.0   | 41.0 | 27.0   | 42.0 | 14.0  | 43.0  | 6.0    |
| 44.0  | 53.0   | 45.0  | 2.0   | 47.0 | 1950.0 | 48.0 | 109.0  | 49.0 | 73.0  | 50.0  | 56.0   |
| 52.0  | 17.0   | 59.0  | 6.0   | 60.0 | 13.0   | 66.0 | 652.0  | 67.0 | 155.0 | 68.0  | 20.0   |
| 78.0  | 12.0   | 79.0  | 79.0  | 80.0 | 1260.0 | 81.0 | 3045.0 | 82.0 | 218.0 | 83.0  | 93.0   |
| 85.0  | 9999.0 | 86.0  | 503.0 | 87.0 | 330.0  | 98.0 | 172.0  | 99.0 | 351.0 | 100.0 | 1428.0 |
| 101.0 | 91.0   | 102.0 | 40.0  |      |        |      |        |      |       |       |        |

## 5 Liste des Dialogprogramms

```
C-----
C +++++ M S S U C H E +++++
C DIESES FORTRAN-DIALOG-PROGRAMM AUF DER BASIS DES
C INFORMATIONSSYSTEMS ADABAS ERLAUBT ES, AUS DER
C AUF MASSEN >= 45 REDUZIERTEN UND 100 % NORMIERTEN
C MASSENSPEKTREN-BIBLIOTHEK DER FIRMA NSRDS/USA
C DIEJENIGEN MASSENSPEKTREN AUSZUWAEHLEN UND
C TEMPORAER AUF BILDSCHIRM UND/ODER PERMANENT AUF
C PLATTE AUSZUGEBEN, DIE VOM ANWENDER DURCH EIN
C EINDEUTIGES KRITERIUM CHARAKTERISIERT WORDEN
C SIND.
C UEBER DIE ANWENDUNG GIBT DIE SUBROUTINE *INFO*
C AUSKUNFT.
C-----
C INTEGER*2 CTL(40),HOSTID,CCODE,FILE,RCODE,FBL,RBL,SBL,VBL,IBL,
+ SBLAE(2)/0/,WBLAE(2)/0/,SPRA,STAT,OPEN,CLOSE,SUCH,LESE,
+ BLANK2
C INTEGER*4 CTLBLK(20),CHIFF(2),PASSW(2),ADD(2),CID,TID,FILLER(2),
+ BLANK,CTIME,UAREA,ISN,ISNLOW,ISNTOT,NUMMER,SUNUM,
+ LETEXT,KSB,KWB,IANSB, IENSB, IANWB, IENWB, ISBUF(2500),
+ DAT1(2),DAT2(13),KENNZ(20),IKENN
C LOGICAL*1 ACC(7),ADAFOR(51),DUMMY,SUBUF(72),WEBUF(72),
+ RECBUF(1910),FORBUF(51),BLANK1,PRO(72,20)
C
C COMMON/CB/ CTLBLK,ISBUF,FORBUF,RECBUF,SUBUF,WEBUF
C COMMON/PARA/ AKSB,AKWB,IANSB,IENSB,IANWB,IENWB
C COMMON/PROTO/ PRO,KENNZ,IKENN
C
C EQUIVALENCE (KSB,SBLAE),(KWB,WBLAE)
C EQUIVALENCE (DAT1,ACC),(DAT2,ADAFOR)
C
C DATA BLANK,BLANK2,OPEN,CLOSE,SUCH,LESE,LETEXT,SPRA
+ /' '',' ','OP','CL','S1','L1','LESE','A '/
C DATA DAT2/'MW,G','0,G1','G2','G3,G','4,G5','G6','G7,G',
+ '8,G9','SN','MF,N','OC,N','01-2','5,.. '/,
+ DAT1/'ACC=','10. '/
C
C----- ADABAS-KONTROLL-BLOCK
C-----
C CTLBLK KONTROLL- BZW. STEUERBLOCK, DER ZUSAMMEN MIT DEN
C STEUERPUFFERN -FORBUF-RECBUF-SUBUF-WEBUF-ISBUF-
C FUER JEDEN ADABAS-AUFRUF NOTWENDIG IST. ER BILDET
C ZUSAMMEN MIT DEN STEUERPUFFERN DEN SOG. VERSTAENDI-
C GUNGSBEREICH. DIE EINZELNEN FELDER DES STEUERBLOCKS
C SIND FORMATIERT UND WERDEN VON DEN EINZELNEN BEFEHLEN
C UNTERSCHIEDLICH VERWENDET.
C-----
```

```

EQUIVALENCE (CTLBLK,CTL),(CTL(1),HOSTID),(CTL(2),CCODE),
C HOSTID SPRACHKENNUNG -IMMER ERFORDERLICH-
C CCODE ADABAS-BEFEHLSKENNUNG -IMMER ERFORDERLICH-
C - S1 SUCHEN DER ISN-NUMMERN
C - L1 LESEN DER ISN-NUMMERN
C - OP OPEN
C - CL CLOSE
+ (CTLBLK(2),CID),(CTL(5),FILE),(CTL(6),RCODE),
C CID BENUTZER-IDENTIFIKATION -BLANK GESETZT-
C FILE DATEINUMMER -IMMER ERFORDERLICH-
C RCODE RESPONSE-CODE
+ (CTLBLK(4),ISN),(CTLBLK(5),ISNLOW),(CTLBLK(6),ISNTOT),
C ISN INTERNE SATZNUMMER
C ISNLOW ISN-UNTERGRENZE -0 GESETZT-
C ISNTOT ISN-ANZAHL
+ (CTL(13),FBL),(CTL(14),RBL),(CTL(15),SBL),
C FBL FORMAT-PUFFER-LAENGE
C RBL RECORD- " "
C SBL SUCH - " "
+ (CTL(16),VBL),(CTL(17),IBL),(CTL(18),STAT),
C VBL WERTE - " "
C IBL ISN - " "
C STAT 1. BYTE STATUS-SCHUTZ -BLANK GESETZT-
C 2. BYTE OPTION FUER WERTESTART
C -BLANK GESETZT-
+ (CTLBLK(10),ADD(1)),(CTLBLK(12),TID),
C ADD ZUSAETZE -BLANK GESETZT-
C TID TERMINAL-IDENTIFIKATION -BLANK GESETZT-
+ (CTLBLK(13),PASSW(1)),(CTLBLK(15),CHIFF(1)),
C PASSW PASSWORD -BLANK GESETZT-
C CHIFF CHIFFRIER-SCHLUESSEL ZUM ANSPRECHEN CHIFFRIERTER
C DATEN -BLANK GESETZT-
+ (CTLBLK(17),FILLER(1)),(CTLBLK(18),CTIME),
C FILLER FUELLER -BLANK GESETZT-
C CTIME BEFEHLS-ZEIT -0 GESETZT-
+ (CTLBLK(19),UAREA)
C UAREA BENUTZER-FELD -BLANK GESETZT-
C
C----- PROGRAMM-KOPF
C

```

```

30 WRITE(5,1)
1 FORMAT(/
+'+++ MS-SUCHE BEGINN +++'/
+'-----'/
+' I 1 INFO I'/
+' I 2 DIALOG START I'/
+' I 3 DIALOG STOP I'/
+' I 4 MENUE I'/
+'-----'/
+'AUSGEWAELTE KENNZIFFER: ')

```

```
 READ(5,*) NUMMER
 GOTO(50,100,9200,60),NUMMER
 GOTO 30
50 CALL INFO
 GOTO 30
60 WRITE(5,2)
 2 FORMAT(/'*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> ***')
 READ(5,3) DUMMY
 3 FORMAT(A1)
 GOTO 30
C
C---- OPEN ADABAS
C
100 HOSTID=SPRA
 CID=BLANK
 TID=BLANK
 UAREA=BLANK
 STAT=BLANK
 DO 110 I=1,2
 ADD(I)=BLANK
 PASSW(I)=BLANK
 FILLER(I)=BLANK
 CHIFF(I)=BLANK
110 CONTINUE
 CTIME=0
 DO 120 I=1,51
 FORBUF(I)=ADAFOR(I)
120 CONTINUE
 DO 130 I=1,20
 KENZ(I)=0
 DO 130 J=1,72
 PRO(J,I)=BLANK1
130 CONTINUE
 CCODE=OPEN
 FILE=10
 ISNLOW=0
 FBL=1
 RBL=7
 SUNUM=0
 IKENN=0
C
 CALL ADABAS(CTLBLK,DUMMY,ACC)
 IF(RCODE.NE.0) GOTO 9000
C
C---- SUCHBEGRIFF- UND SUCHWERT-AUSWAHL
C
150 CALL KRITER(KSB,KWB,&300,&9100)
C
C---- SPEKTRENSUCHE NACH AUSGEWAELHTEN SUCHBEGRIFFEN UND SUCHWERTEN
C
```

```
SBL=SBLAE(2)
VBL=WBLAE(2)
IBL=10000
RBL=1910
FBL=51
CCODE=SUCH
SUNUM=SUNUM+1
CID=SUNUM
C
200 CALL SUCHEN(&500,&600,&9000)
GOTO 150
C
C---- SPEKTRENAUSGABE
C
300 CID=LETEXT
CCODE=LESE
C
400 CALL LESEN(&9000,&9100)
GOTO 150
C
C---- ERGEBNIS DER SUCHE NEGATIV
C
500 WRITE(5,4)
4 FORMAT(/
+'=====I'/
+' I I'/'
+' I SCHADE, KEINE SPEKTREN GEFUNDEN I'/'
+' I I'/'
+'=====I'/)
GOTO 150
600 WRITE(5,5)
5 FORMAT(/
+'=====I'/
+' I I'/'
+' I MEHR ALS 2500 SPEKTREN GEFUNDEN I'/'
+' I I'/'
+'=====I'/)
GOTO 150
C
C---- FEHLERHAFTER ADABAS-AUFRUF
C
9000 WRITE(5,6) CCODE,RCODE
6 FORMAT(/'*** ADABAS-AUFRUF FALSCH ***'/
+'*** CCODE: ',A2,3X,'RCODE: ',I3,' ***')
C
9100 CCODE=CLOSE
CALL ADABAS(CTLBLK)
IF(RCODE.EQ.0) GOTO 9200
WRITE(5,6) CCODE,RCODE
C
9200 WRITE(5,7)
7 FORMAT('+++ MS-SUCHE ENDE +++')
```

9999 STOP  
DEBUG SUBCHK  
END

```

SUBROUTINE KRITER(KSB,KWB,*,*)
C-----
C AUSWAHL UND PRUEFUNG DER SUCHBEGRIFFE / SUCHWERTE
C-----
 LOGICAL*1 DUMMY,CHAR(2)/2*' /,STRING(72),PRO(72,20),KRIT(72),
+ BLANK1/' /,GRENZE/'<'/,OP1(2),KOMMA/' /,PUK/'.'/,
+ PLUS/'+'/,ERR(23),
+ OP2(2),FB(51),RB(1910),SB(72),WB(72),
+ ZIFF1(10)/'0','1','2','3','4','5','6','7','8','9'/,
+ ADAOP(4)/'0','S','N','D'/
 INTEGER*2 CIPHER,BLANK2/' /,PUNKT/'.'/,OP,NACHOP,
+ ZIFF2(10)/'0','1','2','3','4','5','6','7','8',
+ '9'/,
+ OPERAN(21)/'M','M0','M1','M2','M3','M4','M5','M6','M7',
+ 'M8','M9',
+ 'I0','I1','I2','I3','I4','I5','I6','I7',
+ 'I8','I9'/,
+ OPERAT(5)/' /',':',' ','#',' +',' ='/
 INTEGER*4 NUMMER,ZCHAR,KSB,KWB,KST,LENGTH,FLAG,IB(2500),IKENN,
+ OPLONG(21)/11*4,10*3/,CTLBLK(20),AKSB,AKWB,KENNZ(20),
+ IANSB,IENSB,IANWB,IENWB,IANC,IENC,KPRO,AKPRO,IAK,IEK,
+ PROMAX,IERR,
+ ERRTX(6)/'*** ','FALS','CHE ','EING','ABE ','*** '/

C
COMMON/CB/ CTLBLK,IB,FB,RB,SB,WB
COMMON/PARA/ AKSB,AKWB,IANSB,IENSB,IANWB,IENWB
COMMON/PROTO/ PRO,KENNZ,IKENN

C
EQUIVALENCE (CIPHER,CHAR),(OP,OP1),(NACHOP,OP2),(ERRTEX,ERR)

C
10 WRITE(5,1)
1 FORMAT(
+ '+++++ SUCHEN ++++++' /
+ '-----' /
+ 'I 1 INFO I' /
+ 'I 2 NEUE SUCHE I' /
+ 'I 3 ALTE SUCHE (NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN) I' /
+ 'I 4 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN) I' /
+ 'I 5 ALTE SUCHE (LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN) I' /
+ 'I 6 ENDE SUCHE / AUSGABE I' /
+ 'I 7 PROTOKOLL I' /
+ 'I 8 DIALOG STOP I' /
+ 'I 9 MENUE I' /
+ '-----' /
+ 'AUSGEWAELHTE KENNZIFFER: ')
 READ(5,*) NUMMER
 GOTO(40,60,80,90,150,30,45,20,50),NUMMER
 GOTO 10
20 RETURN 2
30 RETURN 1

```

```
40 CALL INFO
 GOTO 10
45 CALL PROTOK
 GOTO 10
50 WRITE(5,2)
 2 FORMAT(/'*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> ***')
 READ(5,7) DUMMY
 GOTO 10
C
C---- AUFBEREITUNG
C 1. NEUE SUCHE / NEUES SUCHKRITERIUM
C
60 KSB=0
 KWB=0
 KPRO=0
 DO 70 J=1,72
 STRING(J)=BLANK1
 KRIT(J)=BLANK1
 SB(J)=BLANK1
 WB(J)=BLANK1
70 CONTINUE
 WRITE(5,3)
 3 FORMAT('*** GEBEN SIE EIN NEUES SUCHKRITERIUM EIN -->')
 IKENN=IKENN+1
 GOTO 200
C
C 2. ALTE SUCHE / NEUES EINZELKRITERIUM HINZUFUEGEN
C
80 KSB=AKSB
 KWB=AKWB
 KPRO=AKPRO
 IANSB=AKSB
 IANWB=AKWB+1
 IAK=AKPRO
 SB(KSB)=ADAOP(4)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=KOMMA
 KRIT(KPRO)=PLUS
 WRITE(5,4)
 4 FORMAT('*** FUEGEN SIE EIN NEUES EINZELKRITERIUM HINZU -->')
 IKENN=IKENN+1
 GOTO 200
C
C 3. ALTE SUCHE / LETZTES EINZELKRITERIUM ERSETZEN
C
90 DO 100 K=IANSB,IENSB
 SB(K)=BLANK1
100 CONTINUE
 DO 110 K=IANWB,IENWB
 WB(K)=BLANK1
110 CONTINUE
```

```
DO 120 K=IAK,IEK
KRIT(K)=BLANK1
120 CONTINUE
KSB=IANSB
KWB=IANWB-1
KPRO=IAK
SB(KSB)=ADAOP(4)
KSB=KSB+1
SB(KSB)=KOMMA
KRIT(KPRO)=PLUS
WRITE(5,5)
5 FORMAT('*** ERSETZEN SIE DAS LETZTE EINZELKRITERIUM -->')
IKENN=IKENN+1
GOTO 200

C
C 4. ALTE SUCHE / LETZTES EINZELKRITERIUM LOESCHEN
C
150 DO 160 K=IANSB,IENSB
SB(K)=BLANK1
160 CONTINUE
DO 170 K=IANWB,IENWB
WB(K)=BLANK1
170 CONTINUE
DO 180 K=IAK,IEK
KRIT(K)=BLANK1
180 CONTINUE
KSB=IANSB
KWB=IANWB-1
KPRO=IAK
SB(KSB)=PUK
KRIT(KPRO)=PUK
IKENN=IKENN+1
GOTO 900

C
C---- EINGABE
C
200 FLAG=0
210 WRITE(5,6) GRENZE
6 FORMAT(71X,A1)
READ(5,7) (STRING(K),K=1,72)
7 FORMAT(72A1)

C
C---- PRUEFUNG AUF DEN PUNKT ALS KRITERIENSCHLUSS, ANZAHL DER ZEICHEN,
C---- LEERZEILE ODER NOTWENDIGE FOLGEZEILE
C
DO 220 J=1,72
J1=72-J+1
CHAR(2)=STRING(J1)
IF(CIPHER.EQ.BLANK2) GOTO 220
IF(CIPHER.EQ.PUNKT) GOTO 230
GOTO 800
220 CONTINUE
GOTO 210
```

```
C
C----- ENDE DER EINGABE, FUELLEN DER PROTOKOLLZEILE, LOESCHEN DER BLANKS
C
230 IANC=1
 IENC=J1
 DO 250 L=IANC,IENC
 KRIT(KPRO+L)=STRING(L)
250 CONTINUE
 KPRO=KPRO+IENC
C
 DO 280 L=1,72
 L1=72-L+1
 CHAR(2)=STRING(L1)
 IF(CIPHER.NE.BLANK2) GOTO 290
280 CONTINUE
 GOTO 800
C
290 ZCHAR=L1
 I=0
300 I=I+1
 IF(I.EQ.(ZCHAR+2).OR.I.EQ.(ZCHAR+1)) GOTO 340
310 CHAR(2)=STRING(I)
 IF(CIPHER.NE.BLANK2) GOTO 300
 IF(I.EQ.ZCHAR) GOTO 330
 I1=I+1
 DO 320 K=I1,ZCHAR
 STRING(K-1)=STRING(K)
320 CONTINUE
330 STRING(ZCHAR)=BLANK1
 ZCHAR=ZCHAR-1
 GOTO 310
C
C----- AUFSCHLUESSELUNG FUER SUCH- UND WERTEPUFFER
C----- 1. SUCHBEGRIFFE
C
340 I=0
350 I=I+1
 OP1(1)=STRING(I)
 I=I+1
 OP1(2)=STRING(I)
 DO 360 J=1,21
 IF(OP.EQ.OPERAN(J)) GOTO 370
360 CONTINUE
 GOTO 800
C
C SUCHBEGRIFF MIT KOMMA IN SUCHPUFFER
C
370 LENGTH=OPLONG(J)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=OP1(1)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=OP1(2)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=KOMMA
```

```
C
C----- 2. GLEICHHEITSZEICHEN
C
 I=I+1
 CHAR(2)=STRING(I)
 IF(CIPHER.EQ.OPERAT(5)) GOTO 380
 GOTO 800

C
C----- 3. SUCHWERT UND NACHFOLGENDER OPERATOR/PUNKT
C
380 KWB=KWB+LENGTH
 KST=0
 M1=I+1
 CHAR(2)=STRING(M1)
 DO 390 J=1,10
 IF(CIPHER.EQ.ZIFF2(J)) GOTO 400
390 CONTINUE
 GOTO 800
400 I=I+1
 CHAR(2)=STRING(I)
 DO 420 J=1,4
 IF(CIPHER.EQ.OPERAT(J)) GOTO 460
420 CONTINUE
 IF(CIPHER.EQ.PUNKT) GOTO 470
 KST=KST+1
 IF(KST.GT.LENGTH) GOTO 800
 DO 440 J=1,10
 IF(CIPHER.EQ.ZIFF2(J)) GOTO 400
440 CONTINUE
 GOTO 800

C
C----- OPERATOR MIT KOMMA IN SUCHPUFFER
C
460 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=ADAOP(J)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=KOMMA
 GOTO 480

C
C----- PUNKT IN SUCHPUFFER / ENDE DES ADABAS-KRITERIUMS
C
470 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=PUK
 FLAG=1

C
C----- SUCHWERT IN WERTEPUFFER
C
480 DO 500 J=1,KST
 J1=I-J
 J2=KWB-J+1
 WB(J2)=STRING(J1)
500 CONTINUE
```

```
C
C----- ENDE DES KRITERIUMS ERREICHT ?
C
 IF(FLAG.EQ.1) GOTO 570
C
C----- PRUEFUNG AUF NACHFOLGENDEN SUCHBEGRIFF ODER SUCHWERT
C
 M2=I+1
 OP2(1)=STRING(M2)
 M2=M2+1
 OP2(2)=STRING(M2)
 DO 510 J=1,21
 IF(NACHOP.EQ.OPERAN(J)) GOTO 350
510 CONTINUE
C
C----- ALTER SUCHBEGRIFF MIT KOMMA IN SUCHPUFFER
C
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=SB(KSB-5)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=SB(KSB-5)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=KOMMA
C
C----- PRUEFUNG AUF NACHFOLGENDEN SUCHWERT + PUNKT/OPERATOR
C
 KWB=KWB+LENGTH
 KST=0
520 I=I+1
 KST=KST+1
 CHAR(2)=STRING(I)
 DO 530 J=1,10
 IF(CIPHER.EQ.ZIFF2(J)) GOTO 540
530 CONTINUE
 GOTO 545
540 IF(KST.GT.LENGTH) GOTO 800
 GOTO 520
C
545 IF(KST.EQ.1) GOTO 800
 KST=KST-1
 IF(CIPHER.EQ.PUNKT) GOTO 470
 DO 550 J=1,4
 IF(CIPHER.EQ.OPERAT(J)) GOTO 560
550 CONTINUE
 GOTO 800
C
C----- NEUER OPERATOR MIT KOMMA IN SUCHPUFFER
C
560 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=ADAOP(J)
 KSB=KSB+1
 SB(KSB)=KOMMA
 GOTO 480
```

```
C
C---- ALLE ZEICHEN ERFASST ?
C
 570 IF(ZCHAR.NE.I) GOTO 800
 GOTO 900
C
C---- FEHLERAUSGANG
C
 800 WRITE(5,8)
 8 FORMAT('*** FALSCH EINGABE, WIEDERHOLEN SIE ***')
 IERR=1
 GOTO 910
C
 810 IF(NUMMER.EQ.3) GOTO 80
 IF(NUMMER.EQ.4) GOTO 90
 GOTO 60
C
C---- POSITIVE EINGABE
C
 900 IENSB=KSB
 IENWB=KWB
 IEK=KPRO
 AKSB=KSB
 AKWB=KWB
 AKPRO=KPRO
C
C---- NEUE EINTRAGUNG INS PROTOKOLL
C
 910 IF(IKENN.LE.20) GOTO 940
 DO 930 J=2,20
 KENNZ(J-1)=KENNZ(J)
 DO 920 J1=1,72
 PRO(J1,J-1)=PRO(J1,J)
 920 CONTINUE
 930 CONTINUE
 PROMAX=20
 GOTO 960
 940 PROMAX=IKENN
C
 960 IF(IERR.EQ.0) GOTO 980
 DO 970 J1=1,23
 PRO(J1,PROMAX)=ERR(J1)
 970 CONTINUE
 KENNZ(PROMAX)=NUMMER
 IERR=0
 GOTO 810
C
 980 DO 990 J1=1,72
 PRO(J1,PROMAX)=KRIT(J1)
 990 CONTINUE
 KENNZ(PROMAX)=NUMMER
C
```

RETURN  
DEBUG SUBCHK  
END

```
 SUBROUTINE SUCHEN(*,*,*)
C-----
C SPEKTRENSUCHE IN DER ADABAS-DATEI
C-----
C
 LOGICAL*1 FB(51),RB(1910),SB(72),WB(72)
 INTEGER*2 CTL(40),RCODE
 INTEGER*4 CTLBLK(20),IB(2500),ISNTOT
C
 COMMON/CB/ CTLBLK,IB,FB,RB,SB,WB
C
 EQUIVALENCE (CTLBLK,CTL),(CTLBLK(6),ISNTOT),(CTL(6),RCODE)
C
C----- LOESCHEN DES ISN-PUFFERS
C
 DO 100 I=1,2500
 IB(I)=0
100 CONTINUE
C
C----- ADABAS-AUFRUF
C
 CALL ADABAS(CTLBLK,FB,RB,SB,WB,IB)
 IF(RCODE.NE.0) RETURN 3
C
 IF(ISNTOT.EQ.0) RETURN 1
 IF(ISNTOT.GT.2500) RETURN 2
C
 WRITE(5,1) ISNTOT
1 FORMAT(/
+ '===== '/
+ ' I I' /
+ ' I TOLL, ',I5,' SPEKTREN GEFUNDEN I' /
+ ' I I' /
+ '===== '/)
C
 RETURN
 DEBUG SUBCHK
 END
```

```

SUBROUTINE LESEN(*,*)
C-----
C LESEN DER GEFUNDENEN ISN'S UND AUSGEBEN DER SPEKTREN
C-----
C
LOGICAL*1 FB(51),RB(1910),SB(72),WB(72),DAT3(4),NOC,DUMMY,
+ NO(72,24),
+ M0(4),M1(4),M2(4),M3(4),M4(4),M5(4),M6(4),M7(4),M8(4),
+ M9(4),
+ I0(3),I1(3),I2(3),I3(3),I4(3),I5(3),I6(3),I7(3),I8(3),
+ I9(3)
INTEGER*2 CTL(40),RCODE
INTEGER*4 CTLBLK(20),IB(2500),ISNTOT,ISN,ZNOFEL,NUMF(5),
+ NUMMER,KZKOMB(95),REST,INUM,IJUMP,UNIT,
+ SPPRIN(2500),IPR,DAHOLD,DAPRIN,
+ ANSW,JA1/'JA '/,JA2/'J '/,NEIN1/'NEIN'/,NEIN2/'N '/
C
COMMON/CB/ CTLBLK,IB,FB,RB,SB,WB
C
EQUIVALENCE (CTLBLK,CTL),(CTLBLK(4),ISN),(CTLBLK(6),ISNTOT),
+ (CTL(6),RCODE),(DAT3,ZNOFEL),
+ (RB(110),NOC),(RB(111),NO),
+ (RB(5),M0),(RB(9),I0),(RB(12),M1),(RB(16),I1),
+ (RB(19),M2),(RB(23),I2),(RB(26),M3),(RB(30),I3),
+ (RB(33),M4),(RB(37),I4),(RB(40),M5),(RB(44),I5),
+ (RB(47),M6),(RB(51),I6),(RB(54),M7),(RB(58),I7),
+ (RB(61),M8),(RB(65),I8),(RB(68),M9),(RB(72),I9)
DATA KZKOMB/0,9,16,17,18,26,27,28,36,37,38,46,47,48,56,57,58,
+126,127,128,136,137,138,146,147,148,156,157,158,236,237,238,
+246,247,248,256,257,258,346,347,348,356,357,358,456,457,458,
+1236,1237,1238,1246,1247,1248,1256,1257,1258,1346,1347,1348,
+1356,1357,1358,1456,1457,1458,2346,2347,2348,2356,2357,2358,
+2456,2457,2458,3456,3457,3458,12346,12347,12348,12356,12357,
+12358,12456,12457,12458,13456,13457,13458,23456,23457,23458,
+123456,123457,123458/
C
C----- KONSTANTE
C
DAHOLD=20
DAPRIN=30
IPR=0
ZNOFEL=0
C
C----- WAHL DER AUSGABE
C
```

```
30 WRITE(5,1)
1 FORMAT(
+'+++++ LESEN ++++++' I'/
+'-----' I'/
+'I 0 INFO I'/
+'I-----' I'/
+'I 1 SPEKTRENNUMMER I'/
+'I 2 MOLEKULARGEWICHT I'/
+'I 3 MOLEKULARFORMEL I'/
+'I 4 10 INTENSIVSTEN MASEN + INTENSITAETEN I'/
+'I 5 NOMENKLATUREN I')
WRITE(5,2)
2 FORMAT(
+'I-----' I'/
+'I 6 BILDSCHIRM (TEMPORAER) + EVTL. DRUCKER I'/
+'I 7 PLATTE (PERMANENT) + EVTL. DRUCKER I'/
+'I 8 BILDSCHIRM + PLATTE + EVTL. DRUCKER I'/
+'I-----' I'/
+'I 9 DRUCKER (BACKGROUND-JOB) I'/
+'I-----' I'/
+'I 10 DIALOG STOP I'/
+'I-----' I'/
+'I 11 MENUE I'/
+'-----' I'/
+'AUSGEWAELTE KENNZIFFERN-KOMBINATION: ')
READ(5,*) NUMMER
IF(NUMMER.EQ.10) RETURN 2
IF(NUMMER.NE.11) GOTO 50
WRITE(5,3)
3 FORMAT('/'*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> ***')
READ(5,4) DUMMY
4 FORMAT(72A1)
GOTO 30

C
C---- PRUEFUNG AUF ZULAESSIGKEIT
C
50 DO 100 I=1,95
IF(NUMMER.NE.KZKOMB(I)) GOTO 100
GOTO 120
100 CONTINUE
WRITE(5,5)
5 FORMAT('*** FALSCH KENNZIFFERN-KOMBINATION ***')
GOTO 30

C
C---- EINZELKENNUNG
C
120 IF(NUMMER.EQ.0) GOTO 150
IF(NUMMER.EQ.9) GOTO 200
GOTO 250
150 CALL INFO
GOTO 30
```

```
C
C---- ABLEGEN ALLER GEFUNDENEN SPEKTRENNUMMERN (ISN'S)
C---- FUER SPAETEREN BACKGROUND-JOB ZUR AUSGABE DER
C---- GESAMTEN SPEKTRENINFORMATION VON BAND
C
 200 WRITE(DAPRIN,7) ISNTOT
 WRITE(DAPRIN,7) (IB(N),N=1,ISNTOT)
 7 FORMAT(12I6)
C
 RETURN
C
C---- AUSGABEKOPF
C
 250 WRITE(5,3)
 READ(5,4) DUMMY
 WRITE(5,6)
 6 FORMAT('===== BEGINN DER AUSGABE =====
+===== '/72(' - '))
C
C---- AUFSCHLUESSELUNG DER KENNZIFFERN-KOMBINATION
C
 UNIT=MOD(NUMMER,10)
 NUMMER=NUMMER/10
 INUM=0
 270 REST=MOD(NUMMER,10)
 NUMMER=NUMMER/10
 INUM=INUM+1
 K=5-INUM+1
 NUMF(K)=REST
 IF(NUMMER.EQ.0) GOTO 280
 GOTO 270
 280 IF(INUM.EQ.5) GOTO 320
C
C---- VERSCHIEBUNG DES NUMMERNFELDES
C
 DO 300 I=1,INUM
 NUMF(I)=NUMF(5-INUM+I)
 300 CONTINUE
C
C---- LESEN UEBER ADABAS-AUFRUF/AUSGABE AUF BILDSCHIRM/PLATTE
C---- ISN-REGISTRATUR FUER DRUCKER
C
 320 DO 1000 I=1,ISNTOT
 IF(IB(I).EQ.0) GOTO 1000
 ISN=IB(I)
C
 CALL ADABAS(CTLBLK,FB,RB)
 IF(RCODE.NE.0) RETURN 1
C
C---- ABLEGEN DER ZAHL DER NOMENKLATURFELDER
C
 DAT3(4)=NOC
```

```
C
C---- AUSGABE
C
 IF(UNIT.EQ.7) GOTO 400
 WRITE(5,17) I
 17 FORMAT('LAUFENDE NUMMER :',I5)
 DO 500 K=1,INUM
 IJUMP=NUMF(K)
 GOTO(340,350,360,370,380),IJUMP
C
C---- BILDSCHIRM
C
 340 WRITE(5,8) (RB(N),N=75,79)
 8 FORMAT('SPEKTRENNUMMER :',5A1)
 GOTO 400
 350 WRITE(5,9) (RB(N),N=1,4)
 9 FORMAT('MOLEKULARGEWICHT : ',4A1)
 GOTO 400
 360 WRITE(5,10) (RB(N),N=80,109)
 10 FORMAT('MOLEKULARFORMEL : ',30A1)
 GOTO 400
 370 WRITE(5,11) M0,M1,M2,M3,M4,M5,M6,M7,M8,M9,
 + I0,I1,I2,I3,I4,I5,I6,I7,I8,I9
 11 FORMAT('10 INTENSIVSTEN M/I: ',10(4A1)/20X,10(1X,3A1))
 GOTO 400
 380 WRITE(5,12)
 12 FORMAT('NOMENKLATUREN :')
 WRITE(5,4) ((NO(N,M),N=1,72),M=1,ZNOFEL)
C
 400 IF(UNIT.EQ.6) GOTO 500
 WRITE(5,17) I
 GOTO(410,420,430,440,450),IJUMP
C
C---- PLATTE
C
 410 WRITE(DAHOLD,8) (RB(N),N=75,79)
 GOTO 500
 420 WRITE(DAHOLD,9) (RB(N),N=1,4)
 GOTO 500
 430 WRITE(DAHOLD,10) (RB(N),N=80,109)
 GOTO 500
 440 WRITE(DAHOLD,11) M0,M1,M2,M3,M4,M5,M6,M7,M8,M9,
 + I0,I1,I2,I3,I4,I5,I6,I7,I8,I9
 GOTO 500
 450 WRITE(DAHOLD,12)
 WRITE(DAHOLD,4) ((NO(N,M),N=1,72),M=1,ZNOFEL)
C
 500 CONTINUE
 WRITE(5,13)
 13 FORMAT(72('-'))
```

```
C
C---- ISN-REGISTRATUR
C
520 WRITE(5,14)
14 FORMAT('*** ANFERTIGUNG EINER DRUCKERLISTE ? (-JA/J- ODER -NEIN/N-
+) ***')
READ(5,15) ANSW
15 FORMAT(A4)
IF(ANSW.EQ.NEIN1.OR.ANSW.EQ.NEIN2) GOTO 1000
IF(ANSW.EQ.JA1.OR.ANSW.EQ.JA2) GOTO 550
GOTO 520
550 IPR=IPR+1
SPPRIN(IPR)=IB(I)
C
1000 CONTINUE
C
WRITE(5,16)
16 FORMAT('===== ENDE DER AUSGABE =====
+=====')
C
C---- ABLEGEN DER AUSGEWAELHTEN SPEKTRENNUMMERN (ISN'S)
C---- FUER SPAETEREN BACKGROUND-JOB ZUR AUSGABE DER
C---- GESAMTEN SPEKTREINFORMATION VON BAND
C
WRITE(DAPRIN,7) IPR
IF(IPR.EQ.0) GOTO 2000
WRITE(DAPRIN,7) (SPPRIN(N),N=1,IPR)
GOTO 2500
C
2000 BACKSPACE DAPRIN
2500 RETURN
DEBUG SUBCHK
END
```

SUBROUTINE PROTOK

```
C-----
C KRITERIEN-PROTOKOLL
C-----
C
 LOGICAL*1 PRO(72,20),DUMMY
 INTEGER*4 KENNZ(20),IKENN
C
 COMMON/PROTO/ PRO,KENNZ,IKENN
C
 WRITE(5,1)
1 FORMAT(/'*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <ENTER/RETURN> ***')
 READ(5,2) DUMMY
2 FORMAT(A1)
 WRITE(5,3)
3 FORMAT('SUCHKRITERIEN-PROTOKOLL MIT MENUE-KENNZIFFERN: '/46('-'))
 DO 100 I=1,20
 WRITE(5,4) KENNZ(I),(PRO(J,I),J=1,72)
4 FORMAT(I1,1X,72A1)
100 CONTINUE
C
 RETURN
 DEBUG SUBCHK
 END
```

SUBROUTINE INFO

```

C-----
C INFORMATIONEN-AUSGABE
C-----
C
C LOGICAL*1 DUMMY
C
C WRITE(5,1)
1 FORMAT(/'*** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>,DANN <ENTER/RETURN> ***')
 READ(5,2) DUMMY
2 FORMAT(A1)
 WRITE(5,3)
3 FORMAT(
+1+ INFO +++ INFO +++ INFO +++ INFO +++ INFO +++ INFO +++ INFO +1/
+1+
+1+ DIESES FORTRAN-DIALOG-PROGRAMM AUF DER BASIS DES +1/
+1+ INFORMATIONSSYSTEMS ADABAS ERLAUBT ES, AUS DER +1/
+1+ AUF MASSEN >= 45 REDUZIERTEN UND 100 % NORMIERTEN +1/
+1+ MASSENSPEKTREN-BIBLIOTHEK DER FIRMA NSRDS/USA +1/
+1+ DIEJENIGEN MASSENSPEKTREN AUSZUWAELHEN UND +1/
+1+ TEMPORAER AUF BILDSCHIRM UND/ODER PERMANENT AUF +1/
+1+ PLATTE AUSZUGEBEN, DIE VOM ANWENDER DURCH EIN +1/
+1+ EINDEUTIGES KRITERIUM CHARAKTERISIERT WORDEN +1/
+1+ SIND. +1)
 WRITE(5,4)
4 FORMAT(
+1+ EIN KRITERIUM SETZT SICH AUS SUCHBEGRIFFEN UND +1/
+1+ SUCHWERTEN ZUSAMMEN, DIE UNTEREINANDER DURCH +1/
+1+ OPERATOREN VERKNUEPFT SIND. +1/
+1+ ERLAUBTE EINGABE-BEGRIFFE (SUCHBEGRIFFE) SIND: +1/
+1+ ----- +1/
+1+ - MW MOLEKULARGEWICHT +1/
+1+ - MO ... M9 DIE 10 INTENSIVSTEN MASSEN +1/
+1+ - IO ... I9 ZUGEOERIGE INTENSITAETEN +1/
+1+ ERLAUBTE EINGABE-WERTE (SUCHWERTE) SIND: +1/
+1+ ----- +1/
+1+ - FUER MW UND MO ... M9 4-STELLIGE ZAHL >= 45 +1/
+1+ - FUER IO ... I9 3-STELLIGE ZAHL <= 100 +1/
+1+ EINGABE-WERTE, DIE DIE ANGEgebenEN GRENZEN +1/
+1+ UNTER- BZW. UEBERSCHREITEN, HABEN EIN FALSCHES +1/
+1+ ERGEBNIS ZUR FOLGE. +1)
 WRITE(5,5)
5 FORMAT(
+1+ MOEGLICHE AUSGABE-WERTE SIND: +1/
+1+ ----- +1/
+1+ - MW S.O. +1/
+1+ - MO ... M9 S.O. +1/
+1+ - IO ... I9 S.O. +1/
+1+ - SN SPEKTRENNUMMER +1/
+1+ - MF MOLEKULARFORMEL +1/
+1+ - NO NOMENKLATUR +1)

```

```
WRITE(5,6)
6 FORMAT(
+'+ ERLAUBTE OPERATOREN SIND: +' /
+'+ ----- +' /
+'+ / LOGISCHE ODER-BEZIEHUNG 2-ER KRITERIEN, +' /
+'+ DIE SICH AUF 1 SUCHBEGRIFF BEZIEHEN. +' /
+'+ : VON/BIS -BEZIEHUNG 2-ER KRITERIEN, +' /
+'+ DIE SICH AUF 1 SUCHBEGRIFF BEZIEHEN. +' /
+'+ # ABER NICHT -AUSSCHLUSS EINES WERTES +' /
+'+ ODER WERTEBEREICHS INNERHALB EINES VORHER +' /
+'+ DURCH DIE VON/BIS-BEZIEHUNG DEFINIERTEN +' /
+'+ WERTEBEREICHS. +' /
+'+ + LOGISCHE UND-BEZIEHUNG 2-ER KRITERIEN +' /
+'+ = GLEICHHEITSBEZIEHUNG ZWISCHEN SUCHBEGRIFF +' /
+'+ UND SUCHWERT. +')

WRITE(5,7)
7 FORMAT(
+'+ MOEGLICHE AUSGABE-MEDIEN SIND: +' /
+'+ ----- +' /
+'+ - BILDSCHIRM (TEMPORAER) + EVTL. DRUCKER +' /
+'+ - PLATTE (PERMANENT) + " " +' /
+'+ - BILDSCHIRM + PLATTE + " " +' /
+'+ - DRUCKER +')

WRITE(5,8)
8 FORMAT(
+'+ EINGABEBEDINGUNGEN: +' /
+'+ ----- +' /
+'+ - JEDES AUS EINZELKRITERIEN BESTEHENDE SUCH - +' /
+'+ KRITERIUM WIRD ALS GESCHLOSSENE ZEICHENKETTE +' /
+'+ EINGELESEN. +' /
+'+ Z.B. Mw=300+M1=45/M1=50:60+I0=70. +' /
+'+ - JEDES EINZELKRITERIUM BESTEHT AUS EINEM DER +' /
+'+ OBEN GENANNTEN SUCHBEGRIFFE, DER DURCH EIN +' /
+'+ GLEICHHEITSZEICHEN (=) MIT DEM ENTSPRECHENDEN +' /
+'+ SUCHWERT VERKNUEPFT IST. +' /
+'+ Z.B. Mw=300. +')

WRITE(5,9)
9 FORMAT(
+'+ - EIN EINZELKRITERIUM KANN DURCH EINEN DER +' /
+'+ OBEN GENANNTEN OPERATOREN MIT EINEM ZWEITEN +' /
+'+ VERKNUEPFT WERDEN. +' /
+'+ Z.B. Mw=300+M1=45. +' /
+'+ - EIN SUCHKRITERIUM KANN AUS EINEM EINZIGEN +' /
+'+ EINZELKRITERIUM BESTEHEN. +' /
+'+ Z.B. Mw=4444. +' /
+'+ - JEDES SUCHKRITERIUM WIRD GRUNDSAETZLICH MIT +' /
+'+ EINEM PUNKT ABGESCHLOSSEN. +')
```

```
WRITE(5,10)
10 FORMAT(
+'+ - JEDES SUCHKRITERIUM DARF MAXIMAL 72 ZEICHEN +' /
+'+ LANG SEIN. DER ERLAUBTE BEREICH IST BEI DER +' /
+'+ ANFRAGE DURCH DEN BEGRENZER < VORGEGEBEN. +')
WRITE(5,11)
11 FORMAT(
+'+ AUSGABEBEDINGUNGEN: +' /
+'+ ----- +' /
+'+ - DIE FORM DER AUSGABE WIRD NACH ERSCHEINEN DES +' /
+'+ AUSGABE-MENUES DURCH EINE KOMBINATION AUS DEN +' /
+'+ ANGEBOTENEN KENNZIFFERN FESTGELEGT. +' /
+'+ - ERLAUBT SIND DABEI ALLE AUFSTEIGENDEN +' /
+'+ KOMBINATIONEN DER KENNZIFFERN 1 - 5 PLUS +' /
+'+ DIE KENNZIFFER 6, 7 ODER 8. +' /
+'+ Z.B. 1357 ODER 2348 +' /
+'+ ABER NICHT 1537 ODER 2384 +')
WRITE(5,12)
12 FORMAT(
+'+ - DIE KENNZIFFERN 0,9,10 UND 11 HABEN BESONDERE +' /
+'+ BEDEUTUNG UND SIND DESHALB INNERHALB EINER +' /
+'+ KOMBINATION NICHT ERLAUBT. +' /
+'+ Z.B. 9 +' /
+'+ ABER NICHT 1359 +')
WRITE(5,13)
13 FORMAT(
+'+ - JEDES SPEKTRUM WIRD IN SEINER ADABAS- +' /
+'+ KONFORMEN, REDUZIERTEN FORM AUSGEGEBEN. DAS +' /
+'+ STICHWORT "DRUCKER" BEDEUTET AUSGABE DER +' /
+'+ SPEKTREN IN IHRER ORIGINALFORM VOM BAND, UND +' /
+'+ ZWAR: +' /
+'+ UNTER DEN KENNZIFFERN 6, 7 UND 8 WERDEN +' /
+'+ BESTIMMTE, NACH DER AUSGABE AM BILDSCHIRM +' /
+'+ AUF ANFRAGE VOM ANWENDER AUSGEWAEHLTE SPEKTREN +' /
+'+ UEBER SCHNELLDRUCKER AUSGEGEBEN. +' /
+'+ UNTER DER KENNZIFFER 9 WERDEN ALLE GEFUNDENEN +' /
+'+ SPEKTREN OHNE AUSGABE AUF BILDSCHIRM ODER +' /
+'+ PLATTE UEBER SCHNELLDRUCKER AUSGEGEBEN. +')
WRITE(5,14)
14 FORMAT(
+'+ SONSTIGE ANMERKUNGEN: +' /
+'+ ----- +' /
+'+ DIE MENUE-TECHNIK DIESES PROGRAMM VERLANGT +' /
+'+ NACH AUFFORDERUNG DURCH EIN FRAGEZEICHEN (?) +' /
+'+ DIE EINGABE EINER DER VORGEGEBENEN ZIFFERN. +' /
+'+ JEDE ANDERE HAT DIE WIEDERHOLUNG DES MENUES +' /
+'+ ZUR FOLGE. +')
```

```
WRITE(5,15)
15 FORMAT(
+'+ DA DER BILDSCHIRM IM GEGENSATZ ZUM DRUCKER +' /
+'+ NICHT PROGRAMMIERBAR IST, ENTHAELT JEDES MENUE +' /
+'+ EINE SPEZIELLE KENNZIFFER, DIE ES DEM ANWENDER +' /
+'+ BEI BEDARF ERLAUBT, EIN AM UNTEREN BILDSCHIRM - +' /
+'+ RAND UNVOLLSTAENDIGES MENUE AM OBEREN +' /
+'+ VOLLSTAENDIG ZU WIEDERHOLEN. DAZU ERSCHEINT NACH +' /
+'+ EINGABE DER ENTSPRECHENDEN KENNZIFFER DIE +' /
+'+ NACHRICHT: +' /
+'+ *** DRUECKEN SIE <CLEAR/LOESCH>, DANN <RETURN/ +' /
+'+ ENTER> ***. +' /
+'+ UNTERBLEIBT DAS LOESCHEN DES BILDSCHIRMS, +' /
+'+ ERSCHEINT DIE NAECHSTE AUSGABE SOFORT NACH +' /
+'+ BETAETIGEN DER <RETURN/ENTER> - TASTE. +')
WRITE(5,16)
16 FORMAT(
+'+ <@@@> FUNKTIONSTASTE DRUECKEN. +' /
+'+ -@@@- KLARTEXT EINGEBEN. +' /
+'+ *** <RETURN/ENTER> DRUECKEN, JEDE VORHERIGE +' /
+'+ - EINGABE VON BELIEBIGEN ZEICHEN IST AN +' /
+'+ DIESER STELLE STRENGSTENS VERBOTEN, DA +' /
+'+ SIE ZUM ABRUCH DES PROGRAMMS FUEHRT. +' /
+'+ +' /
+'+ ***** VIEL GLUECK ***** +' /
+'+ +' /
+'+ INFO +++ INFO +')
C
RETURN
END
```

## 6 Liste des Background-Jobs

### 6.1 Steuerkarten

```
//HCH610MS JOB (0610,220,POIOL),ROTH,NOTIFY=HCH610,MSGLEVEL=(1,1),
// TIME=(10,0),REGION=512K
//*FORMAT PR,DDNAME=FT06F001,FORMS=TN,TRAIN=TN,OVFL=ON
//*MAIN LINES=15
// EXEC FGASCLG
//C.SYSIN DD DSN=TS0610.PP64B.FORT(ADAPRINT),DISP=SHR
//A.SYSIN DD DSN=TS0610.CODETRAN.ASM,DISP=SHR
//G.FT10F001 DD DSN=MSSS,UNIT=T6250,VOL=SER=DV2779,DISP=(OLD,PASS),
// LABEL=(1,SL,,IN)
//G.FT15F001 DD DSN=TS0610.MSPRINT.DATA,DISP=SHR
//
```

### 6.2 Quellprogramm

```
C-----
C HILFSPROGRAMM FUER DIALOG *ADAMSS*
C LESEN UND DRUCKEN VON SPEKTREN IN ORIGINALFORM
C-----
C
C LOGICAL*1 STR1(1700),STR2(30)
C INTEGER*2 ARRAY(3000),MW,PU,NCF,NPEAK,LMG,LNOM,FORMEL(15),
C + NOMEN(850),BLK2/' '/
C INTEGER*4 COPY(100),LHDR,CAS,SPECN,EPA,LMG2,LMG4,TAPE,DISK,
C + LNOM2,LNOM4,NPEAK2,FULL/4/,HALF/2/,PEAKBE,MOLFBE,NOMBE,
C + HDRMAX,NCFMAX,ZPEAK,ICODE,MAX,ISP,ISPRIN(50)
C REAL*4 PURITY,MASS(750),INTE(750)
C REAL*8 DDAT,DZEIT
C
C EQUIVALENCE (ARRAY(1),SPECN),(ARRAY(3),CAS),(ARRAY(5),EPA),
C + (ARRAY(21),MW),(ARRAY(36),PU),(ARRAY(37),NCF),
C + (ARRAY(39),NPEAK),(ARRAY(40),LMG),(ARRAY(42),LNOM),
C + (NOMEN,STR1),(FORMEL,STR2)
C
C-----FORMATE
C
C 1 FORMAT(44X,'AUSZUG AUS DER NSRDS-DATENBANK/USA'/44X,
C + 'ZUM ADAMSS-LAUF VOM: ',A8,'/',A8/44X,37('-')///)
C 2 FORMAT(12I6)
C 3 FORMAT(1X,T12,'LAENGE DES REKORDS: ',I5,T46,'SPEKTRUM-NUMMER: ',9X,
C + I10,T90,'CAS-NUMMER: ',9X,I10/1X,T12,'EPA-NUMMER: ',3X,I10,T46,
C + 'MOLEKULARGEWICHT: ',8X,I10,T90,'REINHEIT: ',15X,F4.1,' %'/1X,T12,
C + 'ZAHL DER PEAKS: ',4X,I5,T46,'LAENGE DER MOLEKULARFORMEL: ',I8,
C + T90,'LAENGE DER NOMENKLATUREN: ',I5)
C 4 FORMAT(1X,T12,'MOLEKULARFORMEL: ',15A2)
C 5 FORMAT(1X,T12,'NOMENKLATUREN: ',7(/1X,T12,54A2)/1X,T12,47A2)
C 6 FORMAT(1X,T12,'MASSEN/INTENSITAETEN: ',125(/1X,T12,12F9.1))
C 7 FORMAT(1X,'*** SPEKTRUM NR. ',I8,' IGNORIERT *** LHDR > HDRMAX ODER
C + NCF > NCFMAX ***')
```

```
C
C-----KONSTANTE
C
 TAPE=10
 DISK=15
C----- MAX. SPEKTRENZAHL: 32170 -----
 MAX=32170
 HDRMAX=18
 NCFMAX=6
 PEAKBE=45
 DO 30 I=1,15
 FORMEL(I)=BLK2
 30 CONTINUE
C
C-----KOPF
C
 CALL DATUM(DDAT,DZEIT)
 WRITE(6,1) DDAT,DZEIT
C
C-----LESEN DER VON ADAMSS AUSGEWAELHTEN SPEKTREN-NUMMERN
C
 50 READ(DISK,2,END=900) ISP
 READ(DISK,2) (ISPRIN(K),K=1,ISP)
C
C-----LESEN DES COPYRIGHT
C
 READ(TAPE) N,(COPY(I),I=1,N)
C
C-----LESEN UND VERARBEITEN DER DATENRECORDS
C
 DO 500 J=1,MAX
 READ(TAPE) L,LHDR,(ARRAY(I-1),I=2,L),(ARRAY(I+L-2),I=2,L)
C
C-----PRUEFUNG DER SPEKTREN-NUMMER AUF ZULAESSIGKEIT
C
 DO 100 I=1,ISP
 IF(J.EQ.ISPRIN(I)) GOTO 120
 100 CONTINUE
 GOTO 500
C
 120 IF(LHDR.GT.HDRMAX.OR.NCF.GT.NCFMAX) GOTO 320
 LMG4=LMG
 LMG2=LMG4/HALF
 IF(MOD(LMG4,FULL).GT.0) LMG2=(((LMG4+FULL)/FULL)*FULL)/HALF
 LNOM4=LNOM
 LNOM2=LNOM4/HALF
 IF(MOD(LNOM4,FULL).GT.0) LNOM2=(((LNOM4+FULL)/FULL)*FULL)/HALF
C
C-----PURITY
C
 PURITY=PU
 PURITY=PURITY/10.
```

```
C
C-----MASSEN/INTENSITAETEN
C
 ZPEAK=NPEAK
 NPEAK2=ZPEAK*HALF-1
 DO 150 I=1,NPEAK2,2
 I2=(I+1)/2
 I1=(PEAKBE-1)+I
 MASS(I2)=ARRAY(I1)
 INTE(I2)=ARRAY(I1+1)
150 CONTINUE
C
C-----MOLEKULARFORMEL
C
 MOLFBE=PEAKBE+NPEAK2+1
 DO 180 I=1,LMG2
 I1=(MOLFBE-1)+I
 FORMEL(I)=ARRAY(I1)
180 CONTINUE
C
C-----NOMENKLATUR
C
 NOMBE=MOLFBE+LMG2
 DO 200 I=1,LNOM2
 I1=(NOMBE-1)+I
 NOMEN(I)=ARRAY(I1)
200 CONTINUE
C
C-----CODEWANDLUNG / FORMEL UND NOMENKLATUR
C
 ICODE=6
 CALL CODTRA(STR1, LNOM4, ICODE)
 CALL CODTRA(STR2, LMG4, ICODE)
C
C-----AUSGABE
C
 WRITE(6,3) L, SPECN, CAS, EPA, MW, PURITY, NPEAK, LMG4, LNOM4
 WRITE(6,4) (FORMEL(K), K=1, LMG2)
 WRITE(6,5) (NOMEN(K), K=1, LNOM2)
 WRITE(6,6) ((MASS(K), INTE(K)), K=1, NPEAK)
C
C-----NEUINITIALISIERUNG
C
 DO 300 I=1,15
 FORMEL(I)=BLK2
300 CONTINUE
 GOTO 500
320 WRITE(6,7)
500 CONTINUE
 REWIND TAPE
 GOTO 50
```

```
C
C-----LOESCHEN DER DATEI MSPRINT.DATA / PROGRAMMENDE
C
900 REWIND DISK
 ISP=0
 WRITE(DISK,2) ISP
 STOP
 END
```

## 7 Literaturhinweise

- /1/ ADABAS-Benutzerhandbuch  
Software AG , Dez. 1974
- /2/ ADABAS-Adascript + Reference Manual  
Software AG , Jun. 1977 , Ver. 1.0.2
- /3/ ADABAS-Anwenderschulung  
Software AG , Aug. 1978
- /4/ IBM System/360 and System/370  
FORTRAN IV Language + Programmers Guide
- /5/ IBM System/360 OS(TSO)  
Code and Go FORTRAN Processor  
Terminal User's Guide
- /6/ TSO-3270 Structured Programming Facility (SPF)  
General Information Manual

Der Autor bedankt sich bei Herrn K u p s c h, ADABAS-Administrator der Hauptabteilung Datenverarbeitung und Instrumentierung, für seine freundliche Unterstützung.