Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Naturwissenschaftliche Fakultät III
Institut für Informatik

11. Übung zur Vorlesung „Deduktive Datenbanken und logische Programmierung“

Wintersemester 2007/2008 — Ausgabe: 2008-01-07

Abgabe: 2008-01-14

Aufgabe 11.1: Parser

Schreiben Sie einen Parser, der eine chemische Summenformel in eine Liste von Paaren (Atom, Anzahl) übersetzt. Beispiel:

- `"CH4"` → `[(c,1), (h,4)]`
- `"C2H6O"` → `[(c,2), (h,6), (o,1)]`

Tipp: `code_type(X,digit)`, `number_codes(N,Ds)`

Aufgabe 11.2: Massenspektrum

Schreiben Sie ein PROLOG-Programm, welches gemessene Massen möglichen Molekülen zuordnet. Viele Moleküle haben die gleiche Masse und um sie dennoch unterscheiden zu können, werden die Moleküle in kleinere Bestandteile zerlegt. Die Bruchstücke sind allerdings selbst keine Atome, sondern wieder Verbindungen.
Gegeben sind die Massen eines Moleküls und von Resten, die nach Abspaltung von Molekülbruchstücken übrig geblieben sind. Zu jeder Masse sind außerdem Moleküle gegeben, die diese Masse (ungefähr) besitzen (`mass_text`).
Weiterhin sind für alle möglichen Differenzen zwischen Molekülrestmassen mögliche Molekülbruchstücke angegeben (`defect_text`).
Die Faktendatei von der WWW-Seite zur Vorlesung enthält folgende Fakten:

- `mass_text(M,C)` ordnet einer Summenformel `C` in Textform die Masse `M` zu, die Summenformel beschreibt ein Molekül oder ein Molekülrest
- `defect_text(MD,M0,M1,C)` die Summenformel `C` beschreibt ein denkbares Molekülbruchstück, `MD` ist dessen Masse, `M0` ist die Masse des kleineren und `M1` die Masse des größeren Molekülrestes. Bis auf Rundungsfehler ist `M1 = M0+MD`.

Mit dem PROLOG-Programm soll man die Frage beantworten können, in welche Reste und Bruchstücke sich ein Molekül zerlegen lässt. Etwa

```
?- mass_formula(_,A), defect_formula(_,_,_,B), mass_formula(_,C), plus_formula(A,B,C).

A = [ (h, 6), (n, 1), (p, 1)]
B = [ (h, 1)]
C = [ (h, 7), (n, 1), (p, 1)] ;

A = [ (h, 6), (n, 1), (p, 1)]
B = [ (c, 1), (h, 2)]
C = [ (c, 1), (h, 8), (n, 1), (p, 1)] ;

...

?- mass_formula(51.025,A), mass_formula(77.04,C), plus_defects(A,Bs,C).
```

```
A = [ (h, 6), (n, 1), (p, 1)]
C = [ (c, 2), (h, 8), (n, 1), (p, 1)]
Bs = [[ (h, 1)], [ (c, 1), (h, 1)], [ (c, 1)]] ;
```