[19]中华人民共和国国家知识产权局

[51]Int. Cl[7]
G06F 9/45
G06F 17/30

[12]发明专利申请公开说明书

[21]申请号 01123105.X

[43]公开日 2001年12月19日

[11]公开号 CN 1327192A

[22]申请日 2001.5.24 [21]申请号 01123105.X

[30]优先权

[32]2000.5.24 [33]US [31]60/206,619

[32]2000.6.30 [33]US [31]09/608,879

[71]申请人 罗姆及哈斯公司

地址 美国宾夕法尼亚州

[72]发明人 J·W·霍克三世

D·皮特里

[74]专利代理机构 中国专利代理(香港)有限公司

代理人 王其灏

权利要求书2页 说明书30页 附图页数2页

[54]发明名称 以计算机为基础的产品配制

[57]摘要

一种由计算机执行的配制产品(例如,化学产品)的方法,包括接收产品 配制脚本,该产品配制脚本用于从若干不同的组分中指导产品的配制。该脚本 可以,例如,提出必需的和任选的组分和有关的替代组分组。为了提供这种指 导,所述脚本可以包括(ⅰ)一种识别配制组分组的组分选择的选项,(ⅱ)至少一 种约束条件,以识别与其中一种配制组分的性能相关的数值范围,和(ⅲ)一 种目标约束条件。

ISSN1008-4274

01.06.08

权 利 要 求 书

1. 一种配制产品的计算机执行方法，该方法包括：接收产品配制脚本，该脚本包括：

一种组分选择选项，该选择选项包括多组配制组分，

一种配制组分的约束条件,该约束条件识别与配制组分性能相关的范围，和

一种目标约束条件；和

处理产品配制脚本以确定用于生产产品的配制组分的集合，该产品具有与目标约束条件一致的第一个性能，其中的集合包括第一配制组分，且处理脚本包括：

确定包括在集合中的最初的一组配制组分；并

确定集合中与最初的配制组分相关的允许范围，该允许范围与配制组分的约束条件相适应。

2. 如权利要求 1 的方法，其中处理脚本包括基于配制知识网的处理，配制知识网使配制组分的性能与目标性能相互联系。

3. 如权利要求 2 的方法，其中处理脚本进一步包括从数据库中检索配制组分性能。

4. 如权利要求 3 的方法，其中从数据库中检索的配制组分性能包含包括原料的配制组分性能和包括制造过程的配制组分性能。

5. 如权利要求 1 的方法，其中处理脚本进一步包括从集合中排除至少一组其它的配制组分。

6. 如权利要求 1 的方法，其中第一配制组分包括第一组中的配制组分。

7. 如权利要求 1 的方法，其中第一配制组分包括不在第一组中的配制组分。

8. 如权利要求 1 的方法，其中由配制约束条件所识别的范围包括允许的范围和不允许的范围，且确定允许的范围包括依照目标约束条件确定使产品配制的值的范围。

9. 如权利要求 1 的方法，其中：

目标约束条件包括值的范围，该值的范围包括第一性能可达到的值和第一性能不可达到的值，且处理脚本包括确定可达到的值和不可达到的值。

10.一种用于配制化学产品的计算机系统，该系统包括：

与用户输入装置连接的处理器；

与处理器连接的数据库，且包括指令以配置处理器：

接收产品配制脚本，该脚本包括：

一种组分选择的选项，该选择选项包括多组配制组分，

一种配制组分的约束条件,该约束条件可识别与配制组分性能相关的范围，和

一种目标约束条件；和

处理产品配制脚本以确定用于生产产品的配制组分的集合，该产品具有与目标约束条件一致的第一个性能，其中的集合包括第一配制组分和指令以处理脚本，包括指令以：

确定包括在集合中的最初的一组配制组分；并

确定集合中与最初的配制组分相关的允许范围，该允许范围与配制组分的约束条件相依从。

01·06·08

说　　明　　书

以计算机为基础的产品配制

本申请要求 2000 年 5 月 24 日提交的美国临时申请系列号为 60/206，619 申请日的权利，和 2000 年 6 月 30 日提交的美国有效申请系列号为 09/608，879 申请日的权利。

化学制造业者，和其他工业的制造业者，依赖于关于他们生产的产品特性的准确信息。需要准确的信息来确定在不同的环境和使用情况下怎样完成产品，并用于指导调查研究和产品开发。市场营销和信息文献也需要准确地公开产品特性。为了确定产品的特性，并生产具有所期望特性的新产品，制造业者依靠调查研究人员（例如，分析化学家）的经验和先进知识。为了确定对现有产品所期望的改进，研究人员通常依靠他们关于现有产品和产品配制的知识和经验。在很多情况下，然而，这也许仍然是一个反复努力的试验，需要调查研究人员生产产品改进方案的样品，并试验这些样品以确定它们是否适宜于销售和大量生产。反复试验的产品开发和试验可以包括大量不能使用的试验产品的生产。这可能是个昂贵的过程。为了减少生产新产品，或改进现有产品中的花费，期望自动化的工具可以帮助预测产品特性，或可以帮助配制具有特定特性的产品。

通常，一方面，本发明以计算机执行配制产品（例如，化学产品）的方法为特征。该方法包括接收产品配制脚本。该产品是由大量不同的组分配制的，且脚本通过提出，例如，必需的和可选的组分和相关的可变组份，来指导产品的配制。为了提供这种指导，所述脚本可以包括(i)一种识别配制组分组的组分选择的选项，（ii）至少一种约束条件，以识别与一种配制组分的性能相关的数值范围，和（iii）一种目标约束条件。处理产品配制脚本以确定用于生产产品的配制组分的集合，其为一种或多种性能符合相关的目标约束条件的产品。脚本的处理还包括从可选的配制组分中的选择。这种选择可以通过确定用于配制产品的配制组分和确定与配制组分相关的允许的范围来完成。允许的范围可以使配制产品符合目标约束条件。

执行过程包括一个或多个的下列特征。可以使用使配制组分的性能和目标

性能相互联系的配制知识网来处理脚本。配制组分性能（其可以从数据库检索）包括原料的性能和与制造过程相关的性能。处理脚本可以包括确定包括在配方内和/或排除在配方外的配制组分。通过约束条件识别的范围可以包括使目标约束条件符合的值的范围和可以致使目标约束条件不符合的值的范围。这些范围可以识别，例如，包括在配方中的一种成分的量。处理脚本还可以包括确定是可以达到的和不可以达到的目标约束条件值。

该方法可以通过使用在普通或特殊用途的计算机系统中的软件来执行。本发明一个或多个实施方案的详述在下面的附图和描述中提出。本发明其它的特征，目的和优点从描述和附图，和权利要求中是显而易见的。

图 1 和 2 是配制知识说明。

一种配制机械可以帮助配制新的化学组合物（一种“目标组合物”）。这是通过静态知识（SK）的处理及确定和动态知识(DK)的处理来完成的。通常，静态知识包括通过配制机械接收的已知的，预定的，或特定的使用值，而动态知识包括通过配制机械完成确定值，和推论图。然而，动态知识是静态知识和/或其它类型动态知识的外在或隐含函数。静态知识可以包括，例如，关于各种化学组合物（例如，质量，体积）的内在性能，制造设备（例如，容量），和制造过程（例如，温度）的数据。静态知识可以在数据库中调出，或通过用户输入来接收。动态知识包括在用配制机械计算之前还未确定的信息的相似类型。动态知识还可以包括计算所需要的中间性能。例如，用户规定了特定的处理温度，然后可以将温度看作是静态知识。然而，如果用户指出约束处理温度的可能值的范围，那么温度是动态知识的一部分，其值可以在计算过程中所规定的范围内变化。特殊变量，像 SK 或 DK 的分类不仅是由知识领域的范围确定的，也是由用户规定的要求确定的。

配制机械可以帮助确定目标组合物的配制。这种确定基于目标组合物所期望的性能（“输出约束条件”）和组成成分的规定性能和用于生产目标组合物的制造过程（“输入约束条件”）。配制机械可以处理输入约束条件，静态知识，和动态知识以确定满足输出约束条件的目标配制组合物。例如，在涂料配制的执行中，如下所讨论的，配制机械可以从一组规定的组成组分中选择，并确定那些组分的量，以生产在特殊范围内具有抗粘连性能的涂料。

配制机械通过使用预定的和/或动态确定的静态与动态知识之间的关联而确

定目标组合物。将这些 SK 和 DK 之间的关联称为配制知识网(FKW)。通常，使用此配制知识网的处理，包括(1)在 SK 和 DK 之间建立配制知识网（FKW），和然后(2)使用配制知识网(FKW)解决配制问题。建立配制知识网可以包括人工过程（即，由程序设计员编制程序的步骤）和自动执行步骤。此处所描述的实施例中，在 PROLOG IV 语言中规定人工确定的关系，且关系的建立和自动确定可以使用 PROLOG IV 程序语言的推论-确定函数来完成。

SK 和 DK 之间的关系可以由配制机械在处理时以定向的或非定向的方式提出。如果我们具有 N 个变量的动态知识组 DK，（DK_n ,n=1-N），和 M 个变量的静态知识组 SK（SK_m，m=1-M），那么 FKW 可以作为一系列函数提出：

$DK_n=f(SK_m)$

$DK_{n1}=f(DK_{n2})$

作为配制计算的推荐式，配制机械也可以使用反函数：

$SK_m=f'(DK_n)$

$DK_{n2}=f'(DK_{n1})$

在非定向表达中，如下面的 Prolog IV 实施例，这些反函数被原函数明确地示出。在较少复杂的表达中，可以用另一种语言来完成，这些反函数可以由程序设计员或配制机械来建立。

用于特殊执行过程的配制知识网将依据特殊的执行过程而不同。例如，直接配制涂料的执行过程将具有与直接生产农业化学品的执行过程所不同的配制知识网。在下列讨论中，先讨论建立配制知识网的通常适用原则，然后是特殊执行过程的实施例。该一般原则可以直接地应用，或适用于各种不同的问题领域。

建立配置知识网的一般原则包括分配变量以代表静态和动态知识，并建立那些变量之间的关系。例如，可以为每项静态知识建立变量 SK_i。同样地，可以为每项动态知识建立变量 DK_i。变量 SK_i 和 DK_i 可以通过程序设计员使用 PROLOG IV 说明来分配，或者在 PROLOG IV 处理过程中，基于推论图，而动态地确定变量。每个变量(DK_i)可以具有相关联的约束条件，该约束条件定义变量的有效设置范围。例如，可以将变量 DK_i 约束至具有 1-10 的值。也可以用一组约束条件（例如，数字，逻辑）来定义变量之间的关系。

一旦 FKW 已经构造，配制机械可以使用 FKW 处理特殊用户要求，如 DK

计算（包括 DK_n 所有可能的值）或 DK 最佳化（包括最佳化 DK_n 所需要的 DK_m 值）。

通过配制总重量（TW）的计算来举例说明变量之间的关系和约束条件的使用的简单实施例。配制总重量是目标组合物的重量，在目标组合物中，它可以作为单独材料的重量之和来确定。这样，对于由一组 n 个材料所组成的目标组合物 ，TW 可以按下式来计算：

$$TW = \sum_{1}^{n} MW_i$$

如一个简单的实施例，假设 TW 可以由两个单独材料 MW_1 和 MW_2 形成，且用户规定了下列约束条件： 1000<=TW<=1050； MW_1=800； 且 100〈=MW_2<=300。配制机械处理此信息并确定满足它们约束条件的 MW_1 和 MW_2 的配方，和对 TW 的约束条件。在这种情况下，配置机械识别，基于输入约束条件，MW_1 必须具有 800 的固定值，且，满足对 MW_2 和 TW 的约束条件，MW_2 可以具有 200-250 之间的值。根据这些结果结合 MW_1 和 MW_2,会生产出目标组合物的重为 1000-1050。

配制机械可以使用存储知识的数据库来确定化学产品的配制信息，该存储知识的数据库是关于它们的特性，和相互之间的关系，各种原料，产品应用，制造过程，和化学产品配制的。这些特性和相互之间的关系可以通过在知识“网”中使不同的变量互相连接而执行。这个“网”在此处称为配制知识网。

前述实施例阐明了配制知识网用于材料数量选择的用途。执行过程还可以使用配制知识网从不同的材料或过程中任意选择。例如，两种不同的材料 X 和 Y，每种均有它自己的约束条件和性能，可以满足与目标组合物相关的约束条件。配制知识网可用于确定 X 和 Y，实际上，满足目标组合物的约束条件。从而，配制知识网可以提供有关材料选择，和数量计算（例如，材料数量，性能值）的知识。

在建立 FKW 中，相同的算法水平处理材料（或过程）选择和质量计算是有用的，以便配制机械可以同时考虑在用户要求中所需要的选择和数量。这可以，例如，通过用数字术语，如提供选择的列表中的等级（r_i）,来表达材料或过程选择而完成。该选择变成了动态知识(DK)的数字函数，且 FKW 完全是数

字的。

使用配制机械确定配制性能可以包括对影响配制性能的每组因素（用变量表达）计算最终得到的一组领域（即，区间）。这些领域可以与界面变量组(IVG)中的变量相关联。实施例 IVG 变量可以包括材料名称，材料数量，配制性能值，和配制及制造过程的值。

在某些执行过程中，可以通过列举所有变量的值，然后计算每组列举的结果（即，使用所允许的变量值的所有排列确定结果）来完成区间计算。例如，如果整数变量 X 和 Y 用于计算 Z，且 1<=X<=2，1<=Y<=3，然后计算 Z 的区间需要对 六种不同的(X,Y)组合（1，1），（1，2），（1，3），（2，1），（2，2），（2，3）计算 Z。

通过解决上面实施例的总重量提出一个更加复杂的难题。当整个范围的列举是可能的时，最好一开始就使用利用区间算法和固定点算法的解算器。在这种情况下，数字解算器可以得到下列推论：

- 通过最初的约束条件将 MW_1 固定在 800。
- 通过最初的约束条件，MW_2 包括在[100,300]之内。
- 从 TW 的附加定义，将 TW 限制在 900 的最小值和 1100 的上限，
- 从最初对 TW 的约束条件我们知道 TW 被限制在 1000-1050。
- 基于前两个加重号中两个 TW 的限制，将 TW 的极小值限制在 1000，极大值限制在 1050。
- 通过 TW 的定义限制 MW_2，即 MW_1 固定在 800，前面的结论是 TW 包括在[1000，1050]的范围之内。所以 MW_2 被限制包括在[200，250]之内。
- 变量的范围没有进一步减小是可能的，所以解算器停止。

在这个实施例中，解算器正确地推断了 MW_2 的范围。然而，在一般情况下，数字解算器可能不能够推断实际最小范围，所以解算器可以与列举算法相结合，该列举算法可以探查解算器设置的减小的约束条件。其可以使用传统的区间分割算法来完成。范围计算与数字列举的这一结合比单独列举更加有效地完成了最终范围的减小，因为它不必搜寻整个最初的约束条件空间，并比单独的区间算法更加可靠。又，很明确在 FKW 中，处理材料或过程选择作为数字变量 DK_{ri}，与数字约束条件一样放置在特殊材料或过程因素选择的相同水平。

如 Prolog IV 语言支持约束条件的逻辑程序和区间算法，的现代程序设计语

言可以使区间算法自动化。在下面的公开中，基于 Prolog IV 的配制机械在此处描述。执行过程可以使用其它的程序设计语言。

动态知识（DK）最佳化

配制机械可以完成动态知识最佳化以找到最佳化特定配制特性的数字变量（V_i）的值。变量 V_i 的最佳值是由变量与其他变量的直接和间接关系（其符合 DK 因素之间直接和间接的关系）影响的。执行过程可以使用一种或多种最佳算法找到变量的最佳值。通常，期望一个可以提供正确最佳值的最佳算法（优选，所选择的算法即使在局部最佳条件下，也能够提供正确的最佳值）。配制机械可以提供变量的最佳化且可以识别获得最佳值所需要的其他变量的当前范围。

Branch 和 Bound 算法是这种最佳算法的已知实施例，其即使在局部最佳条件下也能够找到正确的最佳值。列举算法定义了一搜寻树，并使用 Branch 和 Bound 策略找到此迭代的最佳值。最佳值(O_n)变成下一个迭代的界限，所以所述算法又加了一个新的约束条件情况 $O_{n+1}>O_n$。继续迭代直到树完成。

完成涂料的配制：

下面详细描述适于配制涂料产品的配制机械的操作。在这个实施例中，配制机械用于选择涂料粘合剂，该涂料粘合剂在保持容积(V)，固体溶剂(VS)和颜料容积含量(PVC)在所期望的目标范围内时，可以喷涂较好的后部数据块电阻。涂料产品配制机械使用原料特性数据库（每个均可以在数据库记录中用不同的字段来表达）确定涂料粘合剂，且配制知识网显示了影响后部数据块电阻的不同因素的知识。

图 1 表示捕获涂料配制知识的配制知识网的实施例。此配制知识网执行过程的源程序代码和数据库值在表 1 中列出。

表 1：Prolog IV 程序代码

```
/*  材料数据库  */

材料（1，‘水’，‘水’，[0，1，1，0]）。
材料（2，‘丙二醇’，‘溶剂’，[0，1.036，1.039，0]）。
材料（3，‘Skane M-8’，‘抗微生物剂’，[0.45，1.032，1.0345，0]）。
材料（4，‘Tamol 731’，‘分散剂’，[0.25，1.104，1.605，0]）。
```

```
材料（5，‘Triton CF-10’，‘表面活性剂’，[1，1.05，1.05，0]）。
材料（6，‘Ti-Pure R-700’，‘氧化钛’，[1，4，4，0]）。
材料（7，‘ASP-170’，‘填充剂’，[1，2.58，2.58，0]）。
材料（8，‘Rhoplex HG-74D’，‘粘合剂’，[0.42，1.032，1.0715，7]）。
材料（9，‘Rhoplex HG-95P’，‘粘合剂’，[0.465，1.0608，1.1429，9]）。
材料（10，‘Rhoplex Multilobe 200’，‘粘合剂’，[0.535，1.0648，1.1215，2]）。
材料（11，‘Texanol’，‘聚结剂’，[1，0.95，0.95，0]）。
材料（12，‘Acrysol RM-2020’，‘增稠剂’，[0.2，1.0426，1.2569，0]）。

/*  材料数据库终端  */
/*  关系  */
材料_名称（V）：-
    材料（_,V,_,_）。
材料_种类(V)：-
    材料（_,_,V,_）。
材料_重量_固体（V,[V,_,_,_]）。
材料_提供_密度（V,[_,V,_,_]）。
材料_干燥_密度(V,[_,_,V,_])。
材料_后部_数据块(V,[_,_,_,V])。

/*  建立每种材料的数量关系  */

建立_材料_数量（[]）。
建立_材料_数量（[[D,[配制_重量，湿润_容积，干燥_重量，干燥_容积| Q]]|数
据_数量_列表]）：-
%   获取数据
    材料_提供_密度（D,提供_密度），
    材料_干燥_密度（D,干燥_密度），
    材料_重量_固体（D,重量_固体），
%   设置区间解算器关系
```

```
        湿润_容积=配制_重量./.提供_密度,
        干燥_重量=配制_重量.*.重量_固体,
        干燥_容积=干燥_重量./.干燥_密度,
    建立_材料_数量（数据_数量_列表）。

/*  建立总重量关系  */

    总_重量（[]，0）。
    总_重量（[[D,Q]|数据_数量_列表]，V）：-
      材料_配制_重量（[D,Q],FW），
      V=FW.+.V1,
      总_重量（数据_数量_列表，V1）。

/*  建立总容积关系  */

    总_容积（[]，0）。
    总_容积([[D,Q]|数据_数量_列表]，V)：—
      材料_湿润_容积（[D,Q],WV），
      V=WV.+.V1,
      总_容积（数据_数量_列表，V1）。

/*  建立总干燥容积关系  */

    总_干燥_容积（[]，0）。
    总_干燥_容积（[[D,Q]|数据_数量_列表]，V）：-
      材料_干燥_容积（[D,Q],DV），
      V=DV.+.V1,
      总_干燥_容积（数据_数量_列表，V1）。

/*  建立颜料干燥容积关系  */
```

```
颜料_干燥_容积（颜料_数据_数量_列表，V）：-
    总_干燥_容积（颜料_数据_数量_列表，V）。

/*  建立总干燥重量关系  */

总_干燥_重量（[]，0）。
总_干燥_重量（[[D,Q]|数据_数量_列表,V]：-
  材料_干燥_重量（[D,Q],MDW），
  V=MDW.+.V1,
  总_干燥_重量（数据_数量_列表，V1）。

/*  建立干燥重量粘合剂关系  */

干燥_重量_粘合剂（粘合剂_数据_数量_列表，V）：-
    总_干燥_重量（粘合剂_数据_数量_列表，V）。

/*  建立粘合剂数量关系  */
建立_部分_粘合_重量_数量（[]，_）。
建立_部分_粘合_重量_数量（[[D,[_,_,干燥_重量,_,部分_粘合_重量|Q]]|
粘合剂_数据_数量_列表]，DWB）：-
    部分_粘合_重量=干燥_重量./.DWB,
    建立_部分_粘合_重量_数量（粘合剂_数据_数量_列表，DWB）。

/*  建立实积关系  */
vs(配制_数据_数量_列表，V)：-
   总_干燥_容积（配制_数据_数量_列表，TDV），
   总_容积（配制_数据_数量_列表,TV），
   V=TDVA./.TV。
```

```
/*  建立颜料容积含量关系  */

pvc(颜料_数据_数量_列表，配制_数据_数量_列表，V)：-
    颜料_干燥_容积（颜料_数据_数量_列表，PDV），
    总_干燥_容积（配制_数据_数量_列表，TDV），
    V=PDV./.TDV。

/*  建立 block PVC 关系 */

block_pvc(颜料_数据_数量_列表，配制_数据_数量_列表，V)：-
    pvc(颜料_数据_数量_列表，配制_数据_数量_列表，PVC),
    v=if(bco(PVC,0,0.3),0,if(bco(PVC,0.3,0.4),（PVC.-.0.3）.*.10,1))。

/*  建立粘合剂后部数据块关系  */

粘合_后部_数据块_总（[]，0）.
粘合_后部_数据块_总([[D,Q]|粘合剂_数据_数量_列表],V)：-
    材料_后部_数据块(D,LB),
    部分_粘合_重量（[D,Q],FBW），
    V=(LB.*.FBW).+.V1,
    粘合_后部_数据块_总（粘合剂_数据_数量_列表，V1）。

/*  建立后部数据块关系  */

后部_数据块_(粘合剂_数据_数量_列表,
颜料_数据_数量_列表，配制_数据_数量_列表，V）:-
    粘合_后部_数据块_总（粘合剂_数据_数量_列表，BLBT），
block_PVC(颜料_数据_数量_列表，配制_数据_数量_列表，BPVC),
    V=BLBT.+.BPVC.*.(10.-.BLBT)。
```

表 1：Prolog IV 程序代码 (英文本)

```
/*  Database of Materials */

material(1,'Water','Water',[0,1,1,0]).
material(2,'Propylene Glycol','Solvent',[0,1.036,1.039,0]).
material(3,'Skane M-8','Biocide',[0.45,1.032,1.0345,0]).
material(4,'Tamol 731','Dispersant',[0.25,1.104,1.605,0]).
material(5,'Triton CF-10','Surfactant',[1,1.05,1.05,0]).
material(6,'Ti-Pure R-700','TiO2',[1,4,4,0]).
material(7,'ASP-170','Extender',[1,2.58,2.58,0]).
material(8,'Rhoplex HG-74D','Binder',[0.42,1.032,1.0715,7]).
material(9,'Rhoplex HG-95P','Binder',[0.465,1.0608,1.1429,9]).
material(10,'Rhoplex Multilobe
200','Binder',[0.535,1.0648,1.1215,2]).
material(11,'Texanol','Coalescent',[0,0.95,0.95,0]).
material(12,'Acrysol RM-2020','Thickener',[0.2,1.0426,1.2569,0]).
/* End of Database of Materials */

/* Relationships */

mat_name(V):-
   material(_,V,_,_).

mat_class(V):-
   material(_,_,V,_).

mat_wt_solids(V,[V,_,_,_]).

mat_supplied_density(V,[_,V,_,_]).

mat_dry_density(V,[_,_,V,_]).

mat_late_block(V,[_,_,_,V]).


/*  Builds Quantity Relations for each material */

build_material_quantity([]).
build_material_quantity([[D,[Formula_Wt,Wet_Vol,Dry_Wt,Dry_Vol|Q]
]|Data_Quant_List]) :-
%  Gets data
   mat_supplied_density(D,Supp_Dens),
   mat_dry_density(D,Dry_Dens),
   mat_wt_solids(D,Wt_Sol),
%  Sets Interval Solver Relationships
   Wet_Vol = Formula_Wt./.Supp_Dens,
   Dry_Wt = Formula_Wt.*.Wt_Sol,
   Dry_Vol = Dry_Wt./.Dry_Dens,
build_material_quantity(Data_Quant_List).
```

```
/*  Builds Total Weight Relation */

tot_wt([],0).
tot_wt([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-
   mat_formula_wt([D,Q],FW),
   V = FW.+.V1,
   tot_wt(Data_Quant_List,V1).

/*  Builds Total Volume Relation */

tot_vol([],0).
tot_vol([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-
   mat_wet_vol([D,Q],WV),
   V = WV.+.V1,
   tot_vol(Data_Quant_List,V1).

/*  Builds Total Dry Volume Relation */

tot_dry_vol([],0).
tot_dry_vol([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-
   mat_dry_vol([D,Q],DV),
   V = DV.+.V1,
   tot_dry_vol(Data_Quant_List,V1).

/*  Builds Pigment Dry Volume Relation */

pig_dry_vol(Pigment_Data_Quant_List,V):-
   tot_dry_vol(Pigment_Data_Quant_List,V).


/*  Builds Total Dry Weight Relation */

tot_dry_wt([],0).
tot_dry_wt([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-
   mat_dry_wt([D,Q],MDW),
   V = MDW.+.V1,
   tot_dry_wt(Data_Quant_List,V1).


/*  Builds Dry Weight Binder Relation */

dry_wt_binder(Binder_Data_Quant_List,V):-
   tot_dry_wt(Binder_Data_Quant_List,V).


/*  Builds Quantity Relations for Binders */

build_fract_bind_wt_quantity([],_).
build_fract_bind_wt_quantity([[D,[_,_,Dry_Wt,_,Fract_Bind_Wt|Q]]|
Binder_Data_Quant_List],DWB) :-
   Fract_Bind_Wt = Dry_Wt./.DWB,
   build_fract_bind_wt_quantity(Binder_Data_Quant_List,DWB).
```

```
/*  Builds Volume Solids Relation */

vs(Formulation_Data_Quant_List,V) :-
   tot_dry_vol(Formulation_Data_Quant_List,TDV),


   tot_vol(Formulation_Data_Quant_List,TV),
   V = TDVA./.TV.


/*  Builds Pigment Volume Content Relation */

pvc(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,V) :-
   pig_dry_vol(Pigment_Data_Quant_List,PDV),
   tot_dry_vol(Formulation_Data_Quant_List,TDV),
   V = PDV./.TDV.


/*  Builds block PVC Relation */

block_pvc(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,V)
:-
   pvc(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,PVC),
   V = if(bco(PVC,0,0.3),0,if(bco(PVC,0.3,0.4),(PVC.-
.0.3).*.10,1)).


/*  Builds Binder Late Block Relation */

bind_late_block_tot([],0).
bind_late_block_tot([[D,Q]|Binder_Data_Quant_List],V):-
   mat_late_block(D,LB),
   fract_bind_wt([D,Q],FBW),
   V =(LB.*.FBW).+.V1,
   bind_late_block_tot(Binder_Data_Quant_List,V1).


/*  Builds Late Block Relation */

late_block(Binder_Data_Quant_List,
Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,V) :-
   bind_late_block_tot(Binder_Data_Quant_List,BLBT),

block_PVC(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,BPV
C),
   V = BLBT.+.BPVC.*.(10.-.BLBT).
```

配制机械可以读取原料数据库，以确定原料固有的特性和那些材料的用途。例如，表 1 中的程序代码包括十二种原料的数据库。这个数据库包括每种材料的名称，分类，固体部分，提供的密度，干燥密度，和后部数据块电阻特

性。下表，在下面更加充分地解释，显示这个材料数据库实施例的内容：

表 2

材料_名称 (mat_name)	材料_分类 (mat_class)	材料_重量_固体 (mat_wt_solids)	材料_提供_密度 (mat_supplied_density)	材料_干燥_密度 (mat_dry_density)	粘合_后部_数据块 (bind_late_block)
水	水	0	1	1	
丙二醇	溶剂	0	1.036	1.039	
Skane M-8	抗微生物剂	0.45	1.032	1.0345	
Tamol 731	分散剂	0.25	1.104	1.605	
Triton CF-10	表面活性剂	1	1.05	1.05	
Ti-Pure R-700	二氧化钛	1	4	4	
ASP-170	填充剂	1	2.58	2.58	
Rhoplex HG-74D	粘合剂	0.42	1.032	1.0715	7
Rhoplex HG-95P	粘合剂	0.465	1.0608	1.1429	9
Rhoplex Multilobe 200	粘合剂	0.535	1.0648	1.1215	2
Texanol	聚结剂	0	0.95	0.95	
Acrysol RM-2020	增稠剂	0.2	1.0426	1.2569	

表 1 源代码还包括一组六个函数，以从材料数据库中读取信息。这些函数以伪码的形式表示并如下作进一步的解释：

读取材料数据库的函数：

材料_名称(i)：读取与材料有关的唯一名称。

材料_分类(i)：读取关于材料的分类信息。分类信息可以识别材料的用途。在表 1 中，材料的分类包括“水”、“溶剂”、“粘合剂”等。

材料_重量_固体(i)：返回固体材料的重量部分。

材料_提供_密度(i)：返回所提供形式（液体或固体）的材料密度（kg/liter）。

材料_干燥_密度(i)：返回涂膜材料中的干燥固体密度（kg/liter）。

粘合_后部_数据块(i)：返回基于粘合剂(i)的 18PVC 光泽涂料配方的后部数据块电阻。

在这个实施例中，每种材料的基本单位是重量。对于材料的特殊配制，总材料配方以材料配制重量来表达：

材料_配制_重量[mat_formula_wt](i)是配方中材料(i)的重量。

配制机械处理配制知识网，使材料和有关目标产品的配制知识和制造过程相互联系。在此处的实施例中，配制知识网包括下列配制知识说明：

特定材料的干燥重量是：

材料_干燥_重量(i)=材料_配制_重量(i)*材料_重量_固体(i)

[mat_dry_wt(i) = mat_formula_wt(i) * mat_wt_solids(i)]

湿润涂料中特定材料(i)的容积分配是：

材料_湿润_容积(i)=材料_配制_重量(i)/材料_提供_密度(i)

[mat_wet_vol(i) = mat_formula_wt(i)/mat_supplied_density(i)]

干燥涂料中特定材料(i)的容积分配是：

材料_干燥_容积(i)=材料_干燥_重量(i)/材料_干燥_密度(i)

[mat_dry_vol(i) = mat_dry_wt(i) / mat_dry_density(i)]

涂料总重量是单独材料的重量之和：

总_重量= $\Sigma_{所有材料}$ 材料_配制_重量(i)

[tot_wt = $\Sigma_{all\ material}$ mat_formula_wt(i)]

涂料总容积是单独材料的容积之和：

总_容积= $\Sigma_{所有材料}$ 材料_湿润_容积(i)

[tot_vol = $\Sigma_{all\ material}$ mat _wet_vol(i)]

涂料的总干燥容积是单独材料的干燥容积之和：

总_干燥_容积= $\Sigma_{所有材料}$ 材料_干燥_容积(i)

[tot_dry_vol = $\Sigma_{all\ material}$ mat_dry_vol(i)]

涂料中颜料的干燥容积是近似的和，仅适用于颜料：

颜料_干燥_容积= $\Sigma_{颜料}$ 材料_干燥_容积(i)

[tot_dry_vol = $\Sigma_{pigments}$ mat_dry_wt(i)]

涂料中粘合剂的干燥重量是：

干燥_重量_粘合剂= $\Sigma_{所有粘合剂}$材料_干燥_重量(i)

[dry_wt_binder = $\Sigma_{all\ binders}$ mat_dry_wt(i)]

特定粘合剂(i)的粘合剂部分是：

部分_粘合_重量(i)=材料_干燥_重量(i)/干燥_重量_粘合剂

[fract_bind_wt(i) = mat_dry_wt(i)/ dry_wt_binder]

配方的实积(VS)是：

VS=总_干燥_容积/总_容积

[VS=tot_dry_vol/tot_vol]

配方的颜料容积含量(PVC)是：

PVC=颜料_干燥_容积/总_干燥_容积

[PVC = pig_dry_vol/tot_dry_vol]。

在某些情况下，材料对配方特性的作用是通过一系列不同的公式提出的，根据配方中材料的浓度使用特定的公式。例如，PVC 和数据块电阻之间的关联取决于 PVC 的浓度，并可以用下组的关系表达：

总_PVC_加 (tot_PVC_add)	数据块_PVC (block_PVC)
PVC<30%	0
30%<PVC<40%	(总_PVC -0.3)*10
PVC>40%	1

粘合剂对 block resistance 的贡献是：

粘合_后部_数据块_总= $\Sigma_{i=粘合剂}$（粘合_后部_数据块(i)*部分_粘合_重量（i））

[bind_late_block_tot = $\Sigma_{i=binders}$(bind_late_block(i) * fract_bind_wt(i)]

目标性能，后部数据块是：

后部_数据块=粘合_后部_数据块_总+数据块_PVC*(10-粘合_后部_数据块_总)

[late_block = bind_late_block_tot + block_PVC * (10 – bind_late_block_tot)]。

配制机械可以确定配方的特性，并可以基于产品配制脚本帮助确定改进的配制。产品配制脚本可以概述用于配制产品的配方（即，材料或成分的列表），

约束配方中的特定成分，从材料中任意选择，并约束所生产的输出产品。成分列表的实施例可以包括基础涂料配制配方中的下列成分：

表 3：起点配制

材料	重量
水	5.00
丙二醇	40.00
Skane M-8	2.00
Tamol 731	8.00
Triton CF-10	8.00
Ti-Pure R-700	200.00
ASP-170	0.00
水	20.00
Rhoplex HG-74D	529.00
Texanol	30.00
Acrysol RM-2020	40.00
水	121.00

此起点配制的期望性能可以使用图 1 中的配制知识网通过配制机械来计算（用表 1 中的程序代码表达）。这些起点性能如下所示：

性能	值
总重量（kg）	1003.00
总容积（1）	833.95
实积（%）	32.79
PVC(%)	18.28
后部数据块 (0-10)	7.00

用户可能希望通过改进起点配方来确定一种新的涂料配方，该配方是基于一组用户规定的约束条件的。产品配制脚本可以识别用户规定的约束条件，如这些材料选择和材料水平的约束条件。

材料选择约束条件规定材料组至某种可互换的程度。然而，一组中的特定选择可以具有不同的性能。配制机械可以确定一组中的特定成分，所选择的这些特定成分应当满足用户规定的配制约束条件。原料数据库中的材料分类信息可以用于确定包括在一组中的适宜材料。例如，表 2 的数据库识别 3 种不同的

粘合剂。在改进表 3 中的起点配制时，用户可以规定粘合剂（表 3 中的“Rhoplex HG-74D”）可以由配制机械来改变，并可以是 3 种粘合剂中的一种（i）Rhoplex HG-74D,(ii) Rhoplex HG-95P 或（iii）Rhoplex Multilobe 200。用户还可以规定材料水平约束条件；（例如，“粘合剂的重量包括在 400-600kg 之间）。对于我们的实施例，规定了下列附加约束条件：

水的水平约束条件：

让配方中最后的水的重量包括在 0-300kg 之间。

其他材料：

让起点中所有其他材料选择和水平固定在表 3 配制中所给的它们最初的值上。

此外规定输入材料的约束条件，用户可以为配制（输出）产品规定目标约束条件。在我们的实施例中，这些约束条件如下所示：

让总重量为任意值（未约束的）；

让总容积包括在 833-835 之间；

让实积包括在 32.5%-33.0%之间；

让 PVC 小于或等于 18.5%；且

让后部数据块大于或等于 7.0。

从我们的起点配制约束条件，配制系统，使用表 1 中的程序知识，可以推断下列两种方案空间满足用户规定的输入和目标产品约束条件：

方案#1：

方案#1 是配置机械选择 Rhoplex HG-74D 作为粘合剂的配方。最终的配制“空间”如下所示：

材料	最小重量	最大重量
水	5.00	5.00
丙二醇	40.00	40.00
Skane M-8	2.00	2.00
Tamol 731	8.00	8.00
Triton CF-10	8.00	8.00
Ti-Pure R-700	200.00	200.00
ASP-170	0.00	0.00

水	20.00	20.00
Rhoplex HG-74D	*522.04*	*534.35*
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
水	*114.86*	*128.79*

根据方案#1 生产的涂料的特定性能取决于所选择的特定材料水平，且具有下列范围：

性能	最小值	最大值
总重量(kg)	989.90	1016.14
总容积（1）	833.00	835.00
实积（%）	32.50	33.00
PVC(%)	18.15	18.47
后部数据块(0-10)	7.00	7.00

方案#2

方案#2 是配制机械选择 Rhoplex HG-95P 作为粘合剂的配方。最终的配制空间如下所示：

材料	最小重量	最大重量
水	5.00	5.00
丙二醇	40.00	40.00
Skane M-8	2.00	2.00
Tamol 731	8.00	8.00
Triton CF-10	8.00	8.00
Ti-Pure R-700	200.00	200.00
ASP-170	0.00	0.00
水	20.00	20.00
Rhoplex HG-95P	*502.94*	*514.80*
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
水	*147.35*	*160.53*

根据方案#2 生产的涂料的特定性能取决于所选择的特定材料水平，并具有下列范围：

性能	最小值	最大值
总重量(kg)	1003.29	1028.33
总容积（1）	833.00	835.00
实积（%）	32.50	33.00
PVC(%)	18.15	18.47
后部数据块(0-10)	9.00	9.00

拒绝接受的选择

配制机械还可以确定粘合剂 Rhoplex Multilobe 200 不能满足特定的约束条件。因此，配制机械拒绝 Rhoplex Multilobe 200 作为粘合剂。至于 Rhoplex Multilobe 200，配制知识网可以确定特定的约束条件：

粘合_后部_数据块=2

[bin_late_block = 2]

部分_粘合_重量=1

[fract_bind_wt = 1]

数据块_PVC=0

[block_PVC = 0]

结论中的这一结果是粘合_后部_数据块_总=2 且后部_数据块(late_block)=2。根据要求后部_数据块至少为 7 的特定约束条件，这不是一个有效的结果。所以，配制机械拒绝接受 Rhoplex Multilobe 200。

从上面的实施例可以看出，使用用户规定的约束条件，可以确定满足那些约束条件的配制。然而，已确定的配制方案的特性不能够跨越约束条件所允许的整个空间。例如，虽然最初约束条件显示了可以包括 400-600kg 的粘合剂，如果这个范围，事实上，用于溶液配制，就会违背其他约束条件。为了提供进一步的配制指导，配制机械可以提供修改的输入水平约束条件，以确保配制方案，事实上，满足所期望的约束条件。在这个实施例中，配制机械可以作出如下测定：

- 粘合剂应该是 Rhoplex HG-74D 或 Rhoplex HG-95P。
- 当使用 Rhoplex HG-74D 时，粘合剂的重量应该在 522.04-534.16kg 之间，当

使用 Rhoplex HG-95P 时，粘合剂的重量应该在 502.94-514.61kg 之间。

• 当使用 Rhoplex HG-74D 时，水的重量应该在 116.01-127.48 之间，当使用 Rhoplex HG-95P 时，水的重量应该在 148.50-159.26 之间。

• 总重量应该在 1001.49-1016.22 之间。

• 容积应该在 833-835 之间（与输入约束条件相同）。

• 实积应该在 32.50-32.97 之间。

• PVC 应该在 18.21%-18.46%之间（比较紧密的输入）。

• 后部数据块电阻应该在 7-9 之间（比较紧密的输入）。

如果用户随后进一步约束后部数据块电阻至大于 8，配制机械将推断正确的粘合剂是 Rhoplex HG-95P 且最终产品的特性具有上面表达的数字约束条件。因此，配制机械可以用于确定适宜的材料和材料水平以满足输入和目标性能约束条件。根据所解决问题的复杂性，执行过程可以使用更大量的涂料执行性能和原料和水平。

下列代码表示 PROLOG IV 产品配制脚本的重要细节，规定了表 3 中的基础涂料配制配方，和允许的约束条件和使用基础配方配制涂料的任意选择。

```
ptm([8,-1,0],
/*  下列输入进入一个起点配制  */
/*  和特定配制所允许的范围  */
/*  和所允许的选择  */

/*  下列 7 个组分具有固定的水平  */
[[1，‘研磨’，17，1，  eq(‘水’)，5，5，1],
[2，‘研磨’，18，1，eq（‘丙二醇’），40，40，1],
[3，‘研磨’，7，1，eq（‘Skane M-8’），2，2，1],
[4，‘研磨’，4，1，eq（‘Tamol 731’），8，8，1],
[5，‘研磨’，15，1，eq（‘Triton CF-10’），8，8，1],
[6，‘研磨’，16，1，eq（‘Ti-Pure R-700’），200，200，1],
[7，‘减少’，17，2，eq（‘水’），20，20，1],
/*  下列组分允许从中选择  */
```

/* 三种材料组 */
[8，‘减少’，2，1，inlist（‘Rhoplex HG-74D’，‘Rhoplex HG-95P’，‘Rhoplex Multilobe 200’），400，600，1]，
/* 下列 2 组分具有固定水平 */
[9，‘减少’，3，1，eq（‘Texanol’），30，30，1]，
[10，‘减少’，14，0，eq（‘Acrysol Rm-2020’），40，40，1]，
/* 下列组分可以在 0-300 内变化 */
[11，‘减少’，17，3，eq（‘水’），0，300，1]，

/* 下列命令识别输出数据 */
/* 所要求的和输出约束条件 */
/* 总容积，833-835 */
[[‘总容积’，833,835,_,_]，
/* 不约束总重量 */
[‘总重量’，_,_,_,_]，
/* 总 PVC 可以至 18.5% */
[‘总 PVC’ ,_,0.185, ‘百分比’，_]，
/* 实积可以为 32.5%-33% */
[‘实积’，0.325,0.33, ‘百分比’，_]，
/* 后部数据块必须等于，或大于，7 */
[‘后部数据块’，7_，‘10 标度’，_]，
]，[]）。

上列代码的英文版本：

```
ptm([8,-1,0],
/* The following inputs enter a starting point formulation */
/* as well as permitted ranges for particular formulation */
/* and permitted selections */
```

```
/* The following 7 components have a fixed level */
[[1,'Grind',17,1,eq('Water'),5,5,1],
[2,'Grind',18,1,eq('Propylene Glycol'),40,40,1],
[3,'Grind',7,1,eq('Skane M-8'),2,2,1],
[4,'Grind',4,1,eq('Tamol 731'),8,8,1],
[5,'Grind',15,1,eq('Triton CF-10'),8,8,1],
[6,'Grind',16,1,eq('Ti-Pure R-700'),200,200,1],
[7,'LetDown',17,2,eq('Water'),20,20,1],
/* The following component allows a selection from */
/* a group of three materials */
[8,'LetDown',2,1,inlist(['Rhoplex HG-74D','Rhoplex HG-
95P','Rhoplex Multilobe 200']),400,600,1],
/* The following 2 components have fixed levels */
[9,'LetDown',3,1,eq('Texanol'),30,30,1],
[10,'LetDown',14,0,eq('Acrysol RM-2020'),40,40,1],
/* the following component can vary in the range 0-300 */
[11,'LetDown',17,3,eq('Water'),0,300,1]],

/* The following commands identify the output data */
/* being requested and output constraints */

/* Total volume range 833-835 */
[['Total Volume',833,835,_,_],
/* Total Weight is unconstrained */
['Total Weight',_,_,_,_],
/* Total PVC may be up to 18.5 % */
['Total PVC',_,0.185,'Percent',_],
/* Volume solids can range from 32.5 - 33 percent */
['Volume Solids',0.325,0.33,'Percent',_],
/* Late block must be equal to, or greater than, 7 */
['Late Block',7,_,'10 Scale',_],
],[]).
```

执行过程可以包括图形用户界面前端，以产生前述的输入和查询代码。

研磨料执行过程：

除材料和材料水平的选择和确定外，配制机械还可以用于确定制造，应用，和特定材料的配制过程。在下面的实施例中，配制机械的执行过程用于确定除草剂制备应用的研磨料特性。

在用于农业使用的除草剂的制备中，其中一个处理步骤是研磨料的制备。最终研磨料的重要性能是粒径分布，其在很大程度上，可以确定最终配方的其它重要性能，如粘度外形，稳定性，和悬浮性。这种分布可以用第 50 个百分位粒径和第 90 个百分位粒径来表达。第 50 个百分位粒径是 50%的颗粒小于此粒径。第 90 个百分位粒径是 90%的颗粒小于此粒径。（这些粒径分别由变量粒

径_50_终值(ps_50_final)和粒径_90_终值(ps_90_final)表达)。

研磨料的最终粒径可以从所使用的特定研磨的功率 draw，研磨中小珠的密度，所使用研磨的处理方法，研磨时间，最初的粒径分布，和大量其它的设备，处理，和材料性能而预知。下列单一活性成分研磨料用代表此知识类型的一组变量和方程式表达：

设备数据库

设备数据库识别研磨设备和相关性能。设备数据库可以包括下列数据字段：

研磨机_类型(mill_type)：用于研磨研磨料的研磨机的唯一名称

研磨_功率_马力(milling power_draw)：由这种研磨机_类型所得的最大功率图

珠_类型(bead_type)：所用珠的类型的唯一名称

珠_密度(bead_density)：所用珠的密度

对于这个实施例，设备数据库如下所示：

研磨机_类型 (mill_type)	研磨_功率_马力 (mill_power_draw) (瓦)
Dynomil KD-15(15L)	11,250
Dynomil KD-50(49L)	18,750
Netzsch LMC 20(20L)	7,500
Netzsch LMC 60(50L)	18,750

珠_类型	珠_密度（g/ml）
沙	2.5
铅玻璃	2.5
燧石子	2.6
非铅玻璃	3.6
氧化锆（YTZ）	6.0
碳化钨	15.0

过程数据库

过程数据库识别特定的研磨过程和那些过程的特性。过程数据库可以包括

下列数据字段：

研磨机_操作_类型(mill_operation_type)：识别运行研磨机的特定方法的唯一名称。

d90_与_d50_比率(d90_to_d50_ratio)：运行研磨机的特定方法所期望的第 90 个百分位粒径与第 50 个百分位粒径的比率。

对于这个实施例，过程数据库可以如下所示：

研磨机_操作_类型	d90_与_d50_比率
持续再循环	4.00
一次不连续通过	3.75
两次不连续通过	3.50
三次不连续通过	3.25
四次或更多次不连续通过	3.00

材料数据库

材料数据库包括原料的特性。材料数据库可以包括下列数据字段：

材料_名称：配方中材料的唯一名称

材料_重量_固体：材料中的固体重量部分

材料_干燥_密度：干燥配制中材料的密度

材料_提供_密度：所提供形式的材料的密度

技术_表面_能量(tech_surface_energy)：研磨料中技术活性材料的表面能

粒径_50_最初(ps_50_initial)：研磨料中技术活性材料的粒径

对于这个实施例，材料数据库如下所示：

材料_名称	材料_重量_固体	材料_干燥_密度(g/ml)	材料_提供_密度(g/ml)	技术_表面_能量(J/m2)	粒径_50_最初(微米)
Goal Tech	100%	1.45	1.45	0.04	15
Kelzan	100%	1.50	1.50		
Proxel GXL	25.3%	1.00	1.13		
水	0%	1.00	1.00		

所制备的研磨料的性能，部分地，可以基于一组与各种相关制造变量有关的最初性能所确定。这些变量可以包括下述：

材料_名称	材料_配制_重量	研磨机_类型	珠_类型

珠_大小 (bead_size)	研磨机_操作_类型	研磨_时间 (milling_time)	珠_填充_部分 (bead_fill_fraction)

这些变量可以用于计算一组研磨料的中间性能。获得这些性能的中间性能，和计算，可以包括下列：

材料_干燥_重量（i）=材料_配制_重量（i）*材料_重量_固体（i）

[mat_dry_wt(i) = mat_formula_wt(i) * mat_wt_solids(i)]

材料_干燥_容积（i）=材料_干燥_重量（i）/材料_干燥_密度（i）

[mat_dry_vol(i) = mat_dry_wt(i) / mat_dry_density(i)]

材料_湿润_容积（i）=材料_配制_重量（i）/材料_提供_密度（i）

[mat_wet_vol(i) = mat_formula_wt(i) / mat_supplied_density(i)]

总_干燥_容积_研磨料= $\Sigma_{\text{研磨料中的所有材料}}$材料_干燥_容积（i）

[tot_dry_vol_millbase = $\Sigma_{\text{all material in millbase}}$ mat_dry_vol(i)]

总_容积_研磨料= $\Sigma_{\text{研磨料中的所有材料}}$材料_湿润_容积（i）

[tot_vol_millbase = $\Sigma_{\text{all material in millbase}}$ mat_wet_vol(i)]

总_重量_研磨料= $\Sigma_{\text{研磨料中的所有材料}}$材料_配制_重量（i）

[tot_wt_millbase = $\Sigma_{\text{all material in millbase}}$ mat_formula_wt(i)]

固体_因素_研磨料=总_干燥_容积_研磨料/总_容积_研磨料

[solids_factor_millbase = tot_dry_vol_millbase / tot_vol_millbase]

珠_密度_因素=珠_密度/2.5

[bead_density_factor = bead_density / 2.5]

研磨_能量=研磨_功率_draw*研磨_时间

[milling_energy = milling_power_draw * milling_time]

特定_研磨_能量=研磨_能量/总_重量_研磨料

[specific_milling_energy = milling_energy / tot_wt_millbase]

研磨_效率=固体_因素_研磨料*珠_密度_因素*珠_填充_部分*珠_大小

[milling_efficiency = solids_factor_millbase * bead_density_factor * bead_fill_fraction * bead_size]

面积_与_直径_因素_研磨料=0.006*固体_因素_研磨料/总_重量_研磨料·

[area_to_diameter_factor_millbase = 0.006 * solids_factor_millbase /

tot_wt_millbase]

表面_面积_增加=（研磨_效率*特定_研磨_能量）/技术_表面_能量

[surface_area_increase = (milling_efficiency * specific_milling_energy) / tech_surface_energy]

表面_面积_50_0_研磨料=1，000，000*面积_与_直径_因素_研磨料/粒径_50_最初

[surface_area_50_0_millbase = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase / ps_50_initial]

表面_面积_50_终值_研磨料=表面_面积_50_0_研磨料+表面_面积_增加

[surface_area_50_final_millbase = surface_area_50_0_millbase + surface_area_increase]

最终粒径可以从中间性能计算：

粒径_50_终值=1，000，000*面积_与_直径_因素_研磨料/粒径_50_终值_研磨料

[ps_50_final = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase / surface_area_50_final_millbase]

粒径_90_终值=粒径_50_终值*d90_至_d50_比率

[ps_90_final = ps_50_final * d90_to_d50_ratio]

这些关系在图 2 中列出。执行这个实施例的程序代码是根据表 1 中程序代码的教导得出的。在这个实施例中，有关材料，过程和设备特性的知识是相互联系的。材料选择和水平是由材料_名称和材料_配制_重量表达的。过程选择和参数是由研磨_操作_类型和研磨时间的选择和珠_填充_部分给定的。设备选择和参数是由研磨机_类型和珠_类型选择和珠_大小参数给定的。

下面将描述上述配制知识网和数据库的用途。在下面的实施例中，配制知识网用于确定可产生粒径_50_终值和粒径_90_终值的所期望目标粒径的过程和设备。

研磨料配制知识网的使用可以用用户选择的一组最初约束条件开始。对于这个实施例，用户选择的约束条件包括下列材料，目标研磨料,设备选择，设备参数，过程选择，和过程参数约束条件：

用户规定的材料约束条件：

材料_名称	材料_配制_重量 最小(kg)	材料_配制_重量 最大(kg)
Goal Tech	49.95	49.95
Kelzan	0.05	00.05
Proxel GXL	0.05	00.05
水	49.95	49.95

用户规定的目标研磨料约束条件：

性能	最小值（微米）	最大值（微米）
粒径_50_终值	0.9	1.1
粒径_90_终值		3.5

用户规定的设备选择约束条件：

设备类型	允许的选择
研磨机_类型	Dynomil KD-15(15L)
珠_类型	铅玻璃 非铅玻璃 氧化锆（YTZ）

用户规定的设备参数约束条件：

性能	最小值（mm）	最大值（mm）
珠_大小	1	1

用户规定的过程选择约束条件：

过程类型	允许的选择
研磨_操作_类型	连续再循环 一次不连续通过 两次不连续通过 三次不连续通过 四次或更多次不连续通过

5 用户规定的过程参数约束条件：

性能	最小值	最大值
研磨_时间（分钟）	30	90

珠_填充_部分	0.8	0.8

给定这些约束条件，数据库和关系，配制机械可以动态地确定获得目标粒度所需要的过程。基于上述配方和约束条件，配制机械可以得到有关研磨机操作类型和操作时间的下述结论：

研磨机操作类型总结：

研磨_操作_类型	结果
连续再循环	（没有解决）
一次不连续通过	（没有解决）
两次不连续通过	能够满足约束条件
三次不连续通过	能够满足约束条件
四次或更多次不连续通过	能够满足约束条件

研磨时间总结（固定研磨机_操作_类型之前的变量范围）

性能	最小值（分钟）	最大值（分钟）
研磨_时间	79	90

对于特定珠的类型，研磨时间的范围取决于研磨机操作类型。例如，如果将珠的类型约束为氧化锆(YTZ)，有效的研磨时间范围如下所示：

所选择的研磨机_操作_类型	研磨_时间 最小值 （分钟）	研磨_时间 最大值 （分钟）
连续再循环	（没有解决）	（没有解决）
一次不连续通过	（没有解决）	（没有解决）
两次不连续通过	88	90
三次不连续通过	81	90
四次或更多次不连续通过	79	90

因此，满足用户规定的目标约束条件的一个过程选择是在研磨中使用氧化锆珠，使用88分钟研磨时间的三次不连续通过。这会生产出1.00微米的粒径_50_终值和3.24微米的粒径_90_终值。在方案空间内的其他选择也会满足用户规定的约束条件。

本发明可以在数字电子线路，或计算机硬件，微程序语言，软件或它们的结合中执行。本发明的设备可以在计算机程序产品中执行，该产品确实通过程序处理器配备在机器可读取存储装置中而用于执行；本发明的方法步骤可以通

过程序处理器来完成，该处理器通过对输入数据和产生的输出进行操作，执行指令程序而完成本发明的作用。本发明还可以有益地在一种或多种计算机程序上执行，该程序在计算机系统上是可执行的，该计算机系统包括至少一个相连的程序处理器以接收数据和指令，并传送数据和指令，至数据存储装置，至少一个输入装置，和至少一个输出装置。每种计算机程序均可以在高水平的程序性或目标取向性程序语言中执行，如果希望，或在汇编或机器语言中执行；在任何情况下，语言可以是编译过或解释过的语言。适宜的处理器包括，通过实施例，普通和特殊目的的微处理器。通常，处理器从只读存储器和/或随机存取存储器中接收指令和数据。适于体现计算机程序指令和数据的存储装置包括所有形式的永久性存储器，包括半导体存储装置，如 EPROM,EEPROM,和闪存装置；磁盘如内部硬盘和可更换磁盘；磁光磁盘；和 CD-ROM 盘。前述的任何一种均可以增补，或结合，特殊设计的 ASICs(特定应用的集成电路)。

本发明的大量实施例已经描述。然而，应该明白在不脱离本发明精神和范围下可以进行各种改进。例如，其他程序语言可以用于执行配制知识机械。可以用图形用户界面或网界面使用配制知识机械。材料，过程，和其它数据条目可以在外部数据库中存储,如基于数据库的结构查询语言(SQL)，电子表格，或其它数据存储系统并通过程序代码存取，该程序代码使用标准应用程序界面(APIs)来运行配制机械。

此处描述的配制发明可以用于各种工业中的配制问题。可以从本发明中获益的工业包括食品制备，建筑、石油、化妆品、电子、塑料、材料制造和环境工业。在食品制备业中，可运行配制机械以再配制结合，烹调，和处理食品成分，又再配制过程如发酵和葡萄酒或啤酒的混合。在建筑工业中，用于生产建筑产品，如水泥，砂子，和其它固体材料与水的混合物，以生产砂浆的过程可以再配制。在石油工业中，化学混合物（例如，处理和混合基础油和添加剂以制备电动机油，可以再配制）。在塑料工业中，来源于聚合物珠和塑料添加剂材料（挤压改进剂，颜料等）的成模聚合物的配制。在环境管理工业中，使用树脂，沉降，和其它过程进行的水处理可以再配制。通常所有这些实施例包括一种或多种材料，或来源于一种或多种成分材料的复合材料的配制，和制备中所使用的处理步骤，条件和设备的信息。在下面的权利要求中，这些成分和过程被认为是配制组分。因此，其它的实施方案在下列权利要求的范围之内。

说 明 书 附 图

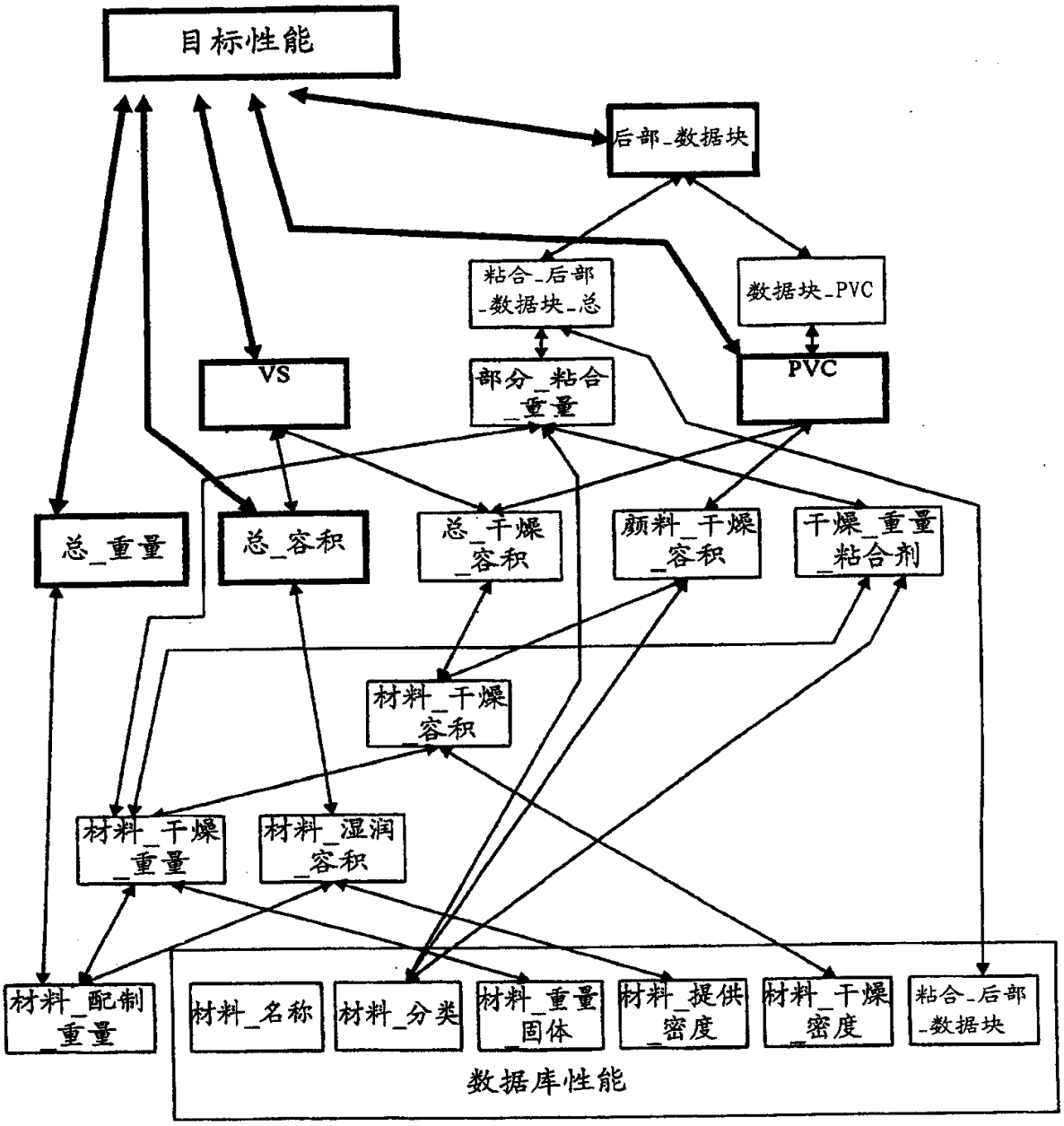
目标性能
后部_数据块
粘合_后部_数据块_总
数据块_PVC
VS
部分_粘合_重量
PVC
总_重量
总_容积
总_干燥_容积
颜料_干燥_容积
干燥_重量_粘合剂
材料_干燥_容积
材料_干燥_重量
材料_湿润_容积
材料_配制_重量
材料_名称
材料_分类
材料_重量_固体
材料_提供_密度
材料_干燥_密度
粘合_后部_数据块
数据库性能

图 1

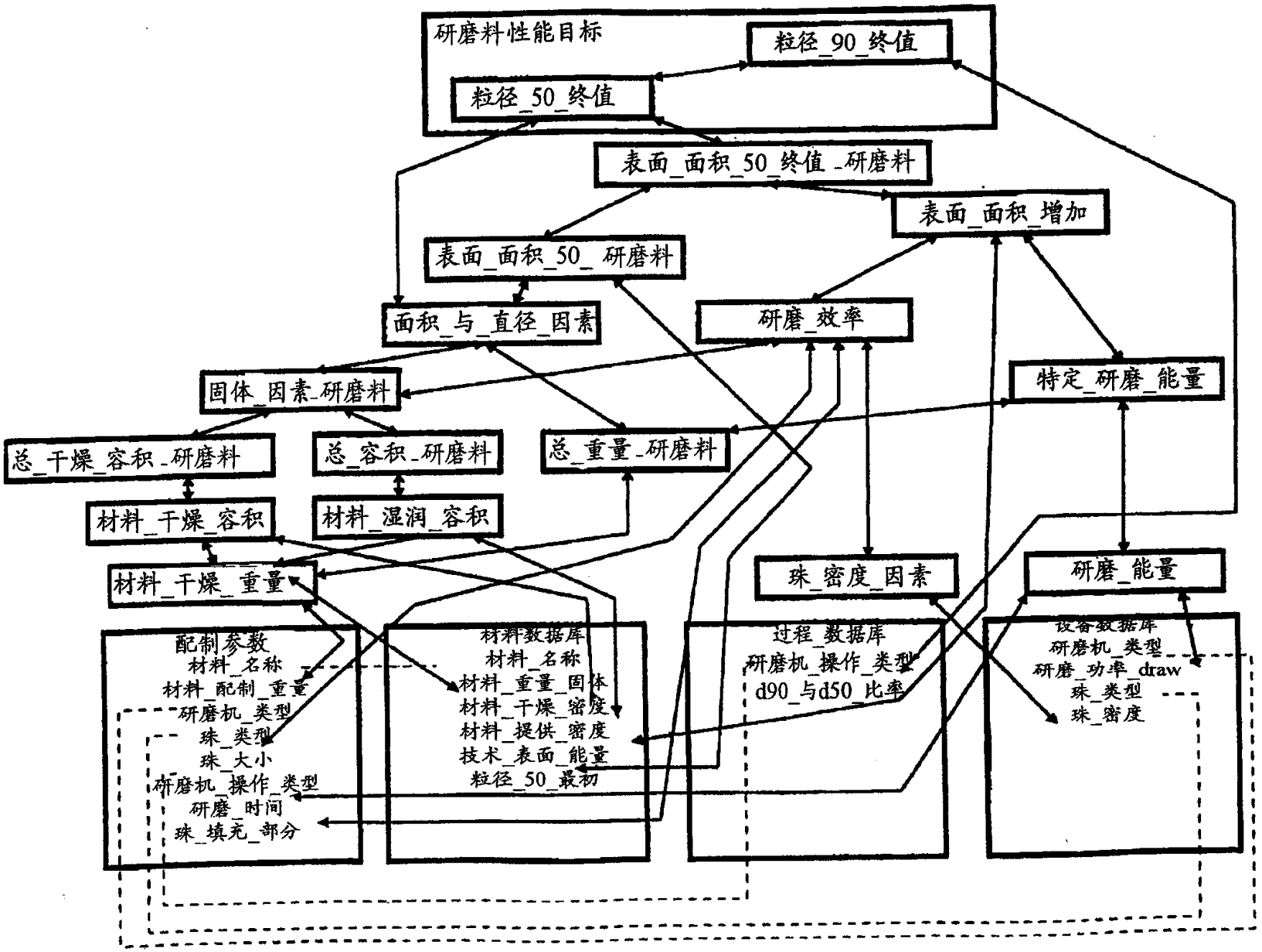
研磨料性能目标
粒径_90_终值
粒径_50_终值
表面_面积_50_终值_研磨料
表面_面积_增加
表面_面积_50_研磨料
面积_与_直径_因素
研磨_效率
固体_因素_研磨料
特定_研磨_能量
总_干燥_容积_研磨料
总_容积_研磨料
总_重量_研磨料
材料_干燥_容积
材料_湿润_容积
材料_干燥_重量
珠_密度_因素
研磨_能量
配制参数
材料_名称
材料_配制_重量
研磨机_类型
珠_类型
珠_大小
研磨机_操作_类型
研磨_时间
珠_填充_部分
材料数据库
材料_名称
材料_重量_固体
材料_干燥_密度
材料_提供_密度
技术_表面_能量
粒径_50_最初
过程_数据库
研磨机_操作_类型
d90_与d50_比率
设备数据库
研磨机_类型
研磨_功率_draw
珠_类型
珠_密度

图 2