



Industria y Comercio
SUPERINTENDENCIA

Nov
26

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO
INVENTARIO

SOLICITUD
PATENTE DE INVENCION

21. **EXPEDIENTE No.** 01-41377

54. **TITULO** FORMULACION DE PRODUCTOS CON BASE EN COMPUTADORA

51. **CLASIFICACION INTERNACIONAL** G 06 F 17/60 ; 159:00

71. **SOLICITANTE** ROHN AND HAAS COMPANY

DOMICILIO Philadelphia, Pennsylvania, Estados Unidos de América.

74. **APODERADO** EMILIO FERRERO

Código No. 1092

22. **BOGOTA, D. C.** 23-V-2001

P/157/79/911

202099

PETITORIO

Superintendencia de Industria y Comercio
Radicación: 01041377 00000000 Folios: 153
Fecha (AMD): 2001-05-23 16:55:05
Trámite: 102 PATENTES D. 1 REGISTRADO/ 411 PRESENTAC
Dependencia: 2020 DIVISION DE NUEVAS INVENCIONES

FORMULARIO UNICO DE SOLICITUD DE PATENTE 2000-3

1

SOLICITUD DE:

Patente de Invención ✓



Patente de Modelo de Utilidad

2

**SOLICITANTE
(71)**

Nombre: **ROHM AND HAAS COMPANY** ✓
sociedad constituida y existente bajo las leyes del
Estado de Delaware, Estados Unidos de América.

Dirección: 100 Independence Mall West, ✓
Philadelphia, Pennsylvania 19106-2399,
Estados Unidos de América.

Teléfono: 546 09 70
E-mail: clientes@camyp.com
Fax: 249 40 70

Domicilio: Philadelphia, Pennsylvania, ✓
Estados Unidos de América.

IDENTIFICACIONC.C. ☐ NIT ☐C.E. ☐ Otro ☐

Número: _____

3

**REPRESENTANTE
O APODERADO
(74)**

Nombre: Emilio FERRERO ✓

Dirección: Carrera 4ª No. 72-35 ✓

Teléfono: 347 36 11
E-mail: cavelier@cavelier.com
Fax: 217 92 11
Domicilio: Bogotá, Colombia

IDENTIFICACIONC.C. ☒ NIT ☐C.E. ☐ Otro ☐

Número: 438.019 TP 31.929

4

**INVENTOR(ES)
(72)**

Nombre: ✓
1- John William HOOK III ✓
410 Twin Streams Drive, Warminster, PA
18974, Estados Unidos de América. ✓

2- Daniel PIETRI ✓
Place De L'Aire, 83600 Les Andrets de
l'Esterel, Francia. ✓

IDENTIFICACIONC.C. ☐ NIT ☐C.E. ☐ Otro ☐

Número: _____

5

TITULO (54)**FORMULACION DE PRODUCTOS CON BASE EN COMPUTADORA ✓**

6

Clasificación Internacional (51)

7

PrioridadSI ☒ NO ☐

(33) País de Origen

US.
US.

(32) Fecha

24 de mayo de 2000 ✓
30 de junio de 2000 ✓

(31) Número de Solicitud

60/206.619 Prov. ✓
09/608.879 ✓

8

Para publicar a partir de la fecha de la presente solicitud a los6 meses ☐12 meses ☐18 meses ☒Otro ☐

9

Comprobante de pago No. 01,21,056 por \$ 356.640.00 Fecha: 2 de Abril de 2001
Comprobante de pago No. 01,16,212 por \$ 100.000.00 Fecha: 12 de Marzo de 2001
Comprobante de pago No. 01,27,934 \$ 100.000.00 Fecha: 7 de Mayo de 2001

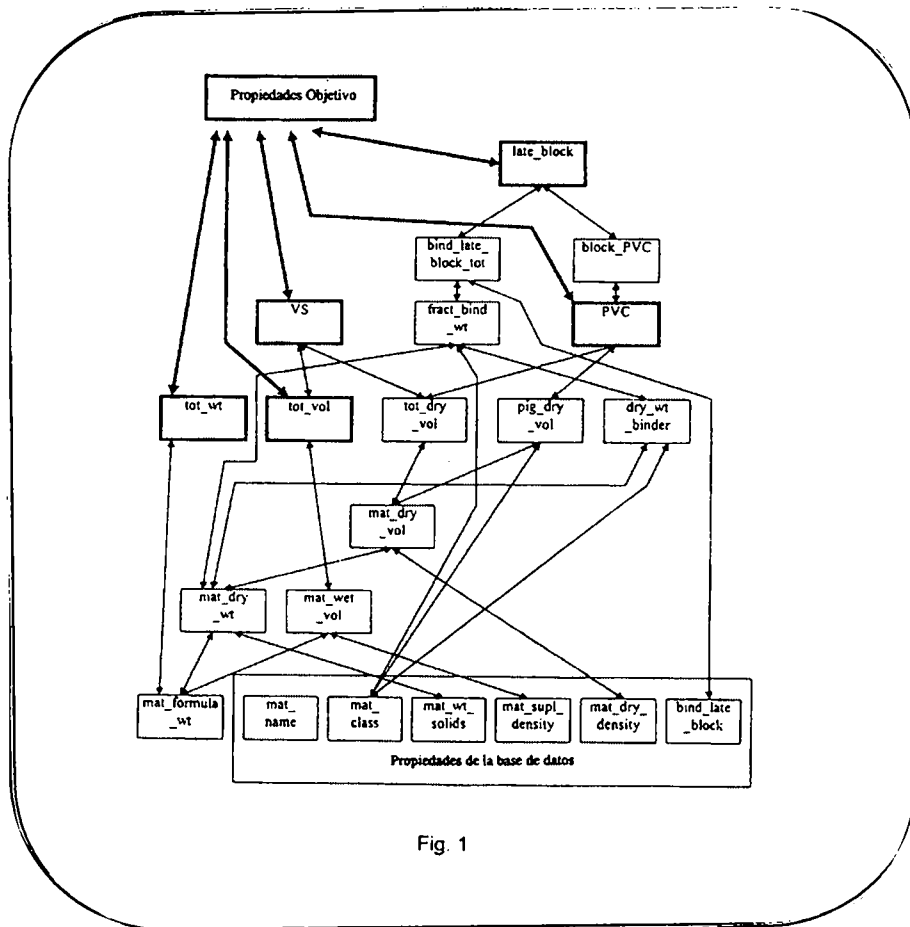
10

ANEXOS

- ☒ Comprobante de pago de la tasa de presentación de la solicitud
- ☐ Comprobante de pago de la tasa por concepto de excedente de palabras en la publicación
- ☒ Comprobante de pago por reivindicación de prioridad (3 Recibos)
- ☒ Certificado de existencia y representación legal cuando el solicitante sea persona jurídica
- ☒ Poderes, si fuere el caso
- ☒ Copia certificada de la primera solicitud, si se reivindica prioridad 1) USA No. 60/206. 619 Prot.
2) USA No. 09/608. 879
- ☐ Traducción simple de la primera solicitud, si se reivindica prioridad
- ☐ Documento de cesión del inventor al solicitante o a su causante
- ☒ Descripción de la invención
- ☒ Una o más reivindicaciones
- ☒ Dibujos y/o planos necesarios (2 pág.)
- ☐ De ser el caso, copia del contrato de acceso
- ☐ De ser el caso, documento que acredite la licencia o autorización de uso de conocimientos de las comunidades indígenas
- ☐ De ser el caso, certificado de depósito del material biológico
- ☒ Arte final 12 x 12.

11

FIGURA CARACTERISTICA:



12

NOMBRE: EMILIO FERRERO

FIRMA:

C.C. 438.019 de Usaquén T.P. 31.929

FORMULACION DE PRODUCTOS CON BASE EN COMPUTADORA

REFERENCIAS A SOLICITUDES RELACIONADAS

La presente solicitud reivindica el beneficio de la fecha de presentación de la solicitud provisional de los Estados Unidos serie No. 60/206,619, la cual fue presentada en mayo 24, 2000 y la solicitud de patente Estadounidense serie NO. 09/608,879, presentada en Junio 30 de 2000.

ANTECEDENTES DE LA INVENCION

Los fabricantes de químicos, y fabricantes y fabricantes en otras industrias, coinciden en información precisa acerca de las características de los productos que ellos producen. La información precisa es necesaria para determinar como se comportan unos productos bajo diferentes ambientes y situaciones de uso y es usado como guía en la investigación y el desarrollo de productos. El mercadeo y la literatura de información puede también requerir de características de productos descritas

precisamente. Para determinar las características de los productos, y para producir nuevos productos con características deseables, los fabricantes confían en la experiencia y el conocimiento avanzado de los empleados en investigación (por ejemplo química analítica). Los investigadores comúnmente confían en su conocimiento y experiencia con respecto a productos existentes y a formulaciones de producto para poder determinar las modificaciones deseables a productos existentes. Muchos casos, sin embargo, esto puede ser un comportamiento de ensayo y error que requieren los empleados de investigación para producir muestras de versiones modificadas de los productos y para ensayar estas muestras y determinar si ellas son adecuadas para la venta y la producción masiva. El desarrollo de productos por ensayo y error y el ensayo de los mismos puede involucrar la producción de una cantidad significativa de productos de ensayo no usables. Esto puede ser un proceso muy costoso. Para reducir el costo en la producción de nuevos productos, o para modificar productos existentes, herramientas automatizadas que pueden ayudar a producir las características de los productos, o que pueden ayudar a formular productos con características particulares, son deseadas.

RESUMEN DE LA INVENCION

En general, en un aspecto, la invención caracteriza un método implementado por computadora de formulación de un producto, (por ejemplo un producto químico). El método incluye recibir una descripción de formulación del producto. El producto es formulado a partir de un número de diferentes componentes y las guías de la descripción de la formulación de producto se establece en, por ejemplo componentes requeridos y componentes opcionales y grupos de componentes alternativos relacionados. Para suministrar tal guía, el manuscrito puede incluir (i) una opción de selección de componentes que identifica conjuntos de componentes de formulación, (ii) por lo menos una restricción para identificar un rango numérico asociado con una propiedad de uno de los componentes de formulación, y (iii) una restricción de objetivo. El manuscrito de formulación de producto es procesado para determinar una colección de componentes de formulación que pueden ser usados para producir el producto tal que una o más propiedades del producto cumplan con las restricciones objetivo asociadas. El procesamiento del manuscrito también incluye seleccionar entre otros

componentes de formulación opcionales. Esta solución puede llevarse a cabo determinando el conjunto de componentes de formulación que van a ser usados en la formulación del producto y determinar un rango permisivo asociado con los componentes de formulación. Este rango permisivo autoriza al producto formulado para cumplir con las restricciones objetivo.

Las implementaciones pueden incluir uno o más de las siguientes características. El manuscrito puede ser procesado usando una red de conocimiento de formulación que inter relaciona propiedades de los componentes de formulación y las propiedades objetivo. Las propiedades del componente de formulación (que pueden ser recuperadas de una base de datos) incluyen propiedades de materias primas y propiedades asociadas con procesos de fabricación. El procesamiento del manuscrito puede incluir complementos de formulación determinantes que deben ser incluidos y/o excluidos en la formulación. Los rangos identificados por restricciones pueden incluir tanto granjas de valores que permiten restricciones objetivo cumplidas y rangos de valores que causarían restricciones objetivo no cumplidas. Estos rangos pueden identificar, por ejemplo, la cantidad de un ingrediente

para ser incluido en una formulación. El procesamiento manuscrito también puede incluir determinar que valores de restricción objetivo son logrables y cuales no lo son.

El método puede ser implementado en software usando un sistema de computador de propósito especial o un sistema general. Los detalles de una o más modalidades de la invención se establecen en los dibujos adjuntos y la descripción que sigue. Otras características, objetivos y ventajas de la invención serán evidentes a partir de la descripción y dibujos, y de las reivindicaciones.

DESCRIPCION DE LAS FIGURAS

Las figuras 1 y 2 son representaciones de conocimientos de formulación.

DESCRIPCION DETALLADA DE LA INVENCION

Un motor de formulación puede ayudar a formular una nueva composición química (una "composición objetivo"). Esto se hace a través del procesamiento del conocimiento estático (SK) y la determinación y el procesamiento del conocimiento dinámico (DK). En general, el conocimiento

estático acompaña los valores conocidos, predeterminados o específicamente usados que son recibidos por el motor de formulación, mientras que el conocimiento dinámico acompaña valores determinados e inferencias extraídas, por medio del procesamiento por el motor de formulación. Así, el conocimiento dinámico es una función explícita o implícita del conocimiento estático y/o de otros tipos de conocimiento dinámico. El conocimiento estático puede incluir, por ejemplo, datos a cerca de propiedades intrínsecas de varias composiciones químicas (por ejemplo masa, volumen), facilidades de fabricación, (por ejemplo capacidad), y procesos de fabricación (por ejemplo, temperatura). El conocimiento estático puede ser representado en una base de datos o recibida por medio de entradas hechas por el usuario. El conocimiento dinámico incluye tipos similares de información que pueden ser indeterminados antes de la complicación por medio del motor de formulación. El conocimiento dinámico también puede incluir propiedades intermedias requeridas para una complicación. Por ejemplo, si una temperatura de proceso es especificada por el usuario, entonces esa temperatura puede ser considerada conocimiento estático. Sin embargo, si el usuario indica un rango de posibles valores que restringen la temperatura de procesamiento, entonces la

temperatura es parte del conocimiento dinámico, valores de los cuales variarán dentro del rango especificado durante una complicación o un cálculo. La clasificación de una variable particular como SK o DK es determinada por el concepto y no solamente por el dominio del conocimiento, sino también el requerimiento del usuario específico.

El motor de formulación puede ayudar a determinar una formulación de una composición objetivo. Esta determinación es basada en las propiedades deseadas ("restricciones de salida") de esta composición objetiva y con base en propiedades especificadas de los ingredientes constituyentes y los procesos de fabricación usados para producir la composición objetivo ("restricciones de entrada"). El motor de formulación puede procesar las restricciones de entrada, el conocimiento estático, y conocimiento dinámico para determinar una composición de terminación objetivo que satisfaga las restricciones de salida. Por ejemplo, en una implementación de formulación de pintura, discutida más adelante, el motor de formulación puede seleccionar entre otros un conjunto de ingredientes constitutivos específicos, y determinar cantidades para estos

ingredientes, para producir una pintura que tenga una propiedad de resistencia de bloque dentro de un rango particular.

El motor de formulación determina una composición objetivo usando unas asociaciones predeterminadas y/o determinadas dinámicamente entre conocimiento estático y dinámico. Estas asociaciones entre SK y DK son referidas como una red de conocimiento de formulación (FKW). En general, el procesamiento usando esta red de conocimiento de formulación involucra (1) construir la red de conocimiento de formulación (FKW) entre SK y DK, y luego (2) usar la red de conocimiento de formulación (FKW) para resolver un problema de formulación. La construcción de la red de conocimiento de formulación puede incluir tanto procesos manuales (por ejemplo, etapas de programación por un programador) y etapas automatizadas. En el ejemplo descrito aquí, las relaciones determinadas manualmente son especificadas en el lenguaje PROLOG IV, y la determinación automatizada y construcción de las relaciones puede ser llevada a cabo usando funciones de inferencia y determinación del lenguaje de programación PROLOG IV.

P

Las relaciones entre SK y DK pueden ser representadas de una manera direccional o no direccional para el procesamiento por medio de un motor de formulación. Si tenemos un conjunto de conocimiento dinámico DK de M variable, (DK_n para $n = 1$ a N), y un conjunto de conocimiento estático SK de M variable (SK_m para $m = 1$ hasta M), entonces el FKW puede ser representado como una serie de funciones:

$$DK_n = f(SK_m)$$

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

Para calcular completamente las recomendaciones de formulación, el motor de formulación también debe usar las funciones inversas:

$$SK_m = f^1(DK_n)$$

$$DK_{n2} = f^1(DK_{n1})$$

En una representación no direccional, tal como el ejemplo Prolog IV que sigue, estas funciones inversas están implicadas explícitamente por las funciones directas. En una representación menos sofisticada, tal como uno pudiera hacer en otro lenguaje, estas funciones

inversas pueden ser construidas por el programador o por el motor de formulación.

La red de conocimiento de formulación usada en una implementación particular difiere dependiendo de la implementación particular. Por ejemplo, una implementación dirigida a formular pinturas tendrán una red de conocimiento de formulación diferente que una implementación dirigida a producir químicos para agricultura. En la discusión posible, un principio generalmente aplicable para construir una red de conocimiento de formulación se discute, seguido por ejemplos de implementación específicos. Este principio general puede aplicarse directamente a, o ser adaptado para, una variedad de dominios de problemas diferentes.

El principio general de construcción de una red de conocimiento de formulación involucra asignar variables para representar conocimiento estático y dinámico, y establecer las relaciones entre estas variables. Por ejemplo, una variable SK_i puede ser creada para cada elemento del conocimiento estático. Similarmente, una variable DK_i puede ser creada para cada elemento de conocimiento dinámico. Las variables SK_i y DK_i pueden ser

asignadas por un programador usando la declaración PROLOG IV, o las variables pueden ser determinadas dinámicamente con base en inferencias extraídas durante el procesamiento PROLOG IV. Cada variable (DK_i) puede tener restricciones asociadas que definen un dominio de establecimientos válidos de esa variable. Por ejemplo, la variable DK_i puede estar restringida a tener valores entre 1 y 10. Las relaciones entre las variables también pueden ser definidas por un conjunto de restricciones (por ejemplo numéricas, Booleanas).

Una vez que el FKW ha sido construido, el motor de formulación puede usar el FKW para procesar la requisición de usuario específica tal como un cálculo de DK (concluyendo todos los valores posibles para un (DK_m)) o la optimización DK (concluyendo qué valor DK_m se necesita para optimizar DK_m).

Un ejemplo simple de relaciones entre variables y el uso de restricciones se ilustra por un cálculo de la formulación de peso total (TW). La formulación de peso total es el peso de una composición objetivo y puede ser determinada como una suma de los pesos de los materiales individuales en la composición objetivo. Así, para una

composición objetivo compuesta de un conjunto de n materiales, TW puede ser calculado como sigue:

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

como un simple ejemplo, asuma que TW puede estar formada por dos materiales individuales, MW_1 y MW_2 , y que el usuario ha especificado en las siguientes restricciones: $1000 \leq TW_2 \leq 1050$; $MW_1 = 800$; y $100 \leq MW_2 \leq 300$. El motor de formulación procesa esta información y determina una formulación de MW_1 y MW_2 que satisfaga las prescripciones y las restricciones sobre TW . En este caso, el motor de formulación reconoce que, con base en las restricciones de entrada, MW_1 debe tener el valor fijo de 800, y, para satisfacer las restricciones sobre MW_2 y TW , MW_2 debe tener un valor entre 200 y 250. Combinando MW_1 y MW_2 de acuerdo con estos resultados se producirá una composición objetivo con un peso entre 1000 y 1050.

Un motor de formulación puede determinar la información de formulación de productos químicos usando una base de datos que almacena conocimiento a cerca de características de, e interrelaciones entre, diversas

materias primas, aplicaciones de producto, procesos de fabricación y formulaciones de producto químico. Estas características e interrelaciones pueden ser implementadas interconectando diferentes variables en una "red" de conocimiento. Esta "red" se recibe aquí como una red de conocimiento de formulación.

El ejemplo anterior ilustra el uso de una red de conocimiento de formulación para la solución de cantidad de material. Implementaciones también pueden usar una red de conocimiento de formulación para seleccionar a partir entre materiales diferentes u opciones de proceso. Por ejemplo, dos materiales diferentes X y Y, cada uno con sus propias restricciones y propiedades, pueden satisfacer una restricción asociada con una composición objetivo. Una red de conocimiento de formulación puede ser usada para determinar qué X y Y estará, de hecho, satisfaciendo las restricciones de la composición objetivo. Así, una red de conocimiento de formulación puede representar conocimiento a cerca de la solución de material, lo mismo que cálculos cuantitativo (por ejemplo cantidad de material, valor de propiedad).

Tratando ambas soluciones de material (o proceso) y el cálculo cuantitativo al mismo nivel del algoritmo es útil en la construcción del FKW de modo que el motor de formulación puede considerar simultáneamente tanto la selección y la cantidad requerida en la requisición de usuario. Este puede ser hecho, por ejemplo, expresando la escogencia de material o proceso en términos numéricos tales como su rango (r_i) en la lista de escogencias permitidas. La selección entonces se vuelve una función numérica del conocimiento dinámico (DK) y del FKW y luego es completamente numérica.

RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA

Determinando las propiedades de formulación usando el motor de formulación se puede incluir el cálculo de un conjunto resultante de dominios (por ejemplo intervalos) para cada uno de un conjunto de raptos (expresado como variable) e influyen las propiedades de la formulación. Estos dominios pueden estar asociados con variables en un grupo de variables de interface (IVG). Las variables IVG de ejemplo pueden incluir nombres de materiales, cantidades de material, valores de

propiedades de formulación, y valores de procesos de formulación y de fabricación.

En algunas implementaciones, los intervalos de cálculo pueden ser llevados a cabo por la numeración de todos los valores de variables, y luego calcular los resultados para cada enumeración (por ejemplo, el resultado puede ser determinado usando todas las permutaciones de los valores de variable permitidos. Por ejemplo, si X y Y son valores enteros usados para calcular Z , y $1 \leq X \leq 2$, y $1 \leq Y \leq 3$, entonces calculando el intervalo de Z requiere calcular Z para 6 diferentes combinaciones (X, Y) $(1,1)$, $(1,2)$, $(1,3)$, $(2,1)$, $(2,2)$, y $(2,3)$.

Un reto mucho más complejo se presenta al resolver el peso total del ejemplo anterior. Mientras que la enumeración del rango completo sería posible, es mejor usar inicialmente un resolovedor de mérito que toma la ventaja de un algoritmo de intervalo aritmético y de punto fijo. En tal caso, un resolovedor numérico puede hacer las siguientes deducciones.

- MW_1 se fija en 800 por la restricción inicial.
- MW_2 está en el rango $[100, 300]$ inclusive por la restricción inicial.
- A partir de la definición de suma de TW, TW está limitada por el valor mínimo de 900 y por el valor máximo de 1100,
- A partir de la restricción inicial sobre TW se conoce que TW está limitada entre 100 y 1050.
- Con base en los dos límites de TW en los dos puntos anteriores, el límite mínimo más blando en TW es 1000, y el límite máximo más pequeño es 1050.
- MW_2 está limitado por la definición de TW, el hecho de que MW_1 está fijado en 800, la conclusión previa es que TW está en el rango $[1000, 1050]$ inclusive. Tal que MW_2 está limitado por el rango $[200, 250]$ inclusive.
- Ningunas reducciones adicionales de los rangos de variable son posible para detener el revolvedor.

En este ejemplo el resolvedor ha concluido correctamente el rango en MW_2 . Sin embargo, en el caso general, los resolvedores numéricos pueden no ser capaces

de concluir los rangos mínimos reales, de manera que el resolvidor puede ser combinado con un algoritmo de enumeración que explora el conjunto de restricción reducido del resolvidor. Esto puede ser llevado a cabo usando un algoritmo de partición de intervalo clásico. Esta combinación de cálculo de rango y enumeración numérica logra entonces la reducción final de los rangos más eficientemente que la enumeración sola, ya que este no tiene que buscar el espacio de recepción en completo inicial, y más confiablemente que el intervalo aritmético solamente. Nuevamente, es claro que el tratamiento del material o de proceso, variables numéricas de DK_{fi} en los lugares FKW la selección de un material específico o de un elemento de proceso al mismo nivel que las restricciones numéricas.

Los lenguajes de programación modernos soportan programación de lógica de restricciones y aritmética de intervalos, tal como el lenguaje PROLOG IV, puede automatizar tales cálculos a intervalos. En la descripción que sigue, un motor de formulación con base en PPROLOG IV será descrita aquí. Las implementaciones pueden usar otros lenguajes de programación.

OPTIMIZACION DEL CONOCIMIENTO DINAMICO (DK)

El motor de formulación puede llevar a cabo la optimización del conocimiento dinámico para encontrar un valor de una variable numérica (V_i) que optimiza unas características de formulación particular. Un valor óptimo de una variable V_i es afectada por las relaciones directas e indirectas de la variable con otras variables (esto corresponde a relaciones directas e indirectas entre elementos DK). Las implementaciones pueden usar uno o más algoritmos de optimización para encontrar un valor óptimo para una variable. En general, un algoritmo de optimización que puede suministrar un valor óptimo verdadero es deseable (preferiblemente, el algoritmo seleccionado debe suministrar optimización verdadera aún en la presencia de óptimos locales). El motor de formulación puede suministrar para la optimización de una variable y puede identificar un dominio corriente de las otras variables requeridas para obtener esta optimización.

El algoritmo de ramificación y enlace es un ejemplo bien conocido de tal algoritmo de optimización el cual puede encontrar un valor óptimo verdadero aún en la

presencia de óptimos locales. El algoritmo de enumeración define un árbol de búsqueda y usos de la estrategia Branch and Bound para encontrar el óptimo de esta interacción. Ese óptimo (O_n) se vuelve límite para la siguiente iteración, de manera que el algoritmo agrega una nueva restricción que establece que $O_{n+1} > O_n$ la iteración continúa hasta que el árbol está completado.

Implementación de Formulación de Pintura

La operación de un motor de formulación adaptado para productos de formular productos de pintura será ahora detallado. En este ejemplo, el motor de formulación es usado para seleccionar un aglomerante de pintura que puede dar una buena resistencia de bloque tardío a una pintura mientras que se mantiene el volumen (V), los sólidos de volumen (VS) y contenido de volumen de pigmentos (PVC) dentro de rangos de objetivo deseados. El motor de formulación del producto de pintura determina el aglomerante de pintura usando una base de datos de características de materia prima (cada una de las cuales puede ser expresada por un campo diferente en el registro de la base de datos), y una red de conocimiento de

formulación que expresa el conocimiento de los diferentes factores que afectan la resistencia del bloque tardío.

La figura 1 muestra un ejemplo de red de conocimiento de formulación que captura el conocimiento de formulación de pinturas. El código fuente de programa y los valores de la base de datos para una implementación de esta red de conocimiento de formulación se dan en la tabla 1.

Tabla 1:

Código de programa Prolog IV

/* 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).
```

La formulación puede tener acceso a una base de datos y a todas las materias primas para determinar características inherentes de las materias primas lo mismo que los usos de esos materiales. Por ejemplo, el código de programa de la tabla 1 incluye una base de datos de 12 materias primas. Esta base de datos incluye el nombre, clasificación, fracción de sólidos, densidad suministrada, densidad en seco, y características de resistencia de bloque tardío en cada material. La siguiente tabla explica más completamente, y muestra el contenido de esta base de datos de material de ejemplo:

Tabla 2

Mat_name	Mat_Class.	Mat_wt_solids	Mat_supp_lied_Density	Mat_dry_density	Bind_late_block
Agua	Agua	0	1	1	
Propilenglicol	Disolvente	0	1,036	1,039	
Skane M-8	Biocida	0,45	1,032	1,0345	
Tamol 731	Dispersante	0,25	1,104	1,605	
Triton CF-10	Tenso Activo	1	1,05	1,05	
Ti-Pure R-700	TiO ₂	1	4	4	
ASP-170	Extendedor	1	2,58	2,58	
Rhoplex HG-74D	Aglomerante	0,42	1,032	1,0715	7
Rhoplex HG-95P	Aglomerante	0,465	1,0608	1,1429	9
Rhoplex Multilobe 200	Aglomerante	0,535	1,0648	1,1215	2
Texanol	Coalescente	0	0,95	0,95	
Acrysol Rm-2020	Espesante	0,2	1,0426	1,2569	

El código fuente de la tabla 1 también incluye un conjunto de seis funciones para aplicar la información a partir de base de datos de materiales. Estas funciones se muestran en forma de pseudo código y explicado adicionalmente como sigue:

Funciones para acceder la base de datos de materiales

mat_name (i): accesos a un nombre único asociado con un material.

mat_class (i): información de clasificación de acceso a cerca del material. La información de clasificación puede identificar usos de material. En la tabla 1, las clasificaciones de material incluyen "agua", "disolvente", "aglomerante", etc.

mat_wt_solidos (i): regresa la fracción de peso de material(i) que es sólido

mat_supplied_density (i): retorna la densidad (kg/li) de un material en su forma suministrada (líquido o sólido)

`mat_dry_density (i)`: retorna la densidad (kg/litro) de los sólidos secos del material en una película de pintura.

`mat_late_block (i)`: regresa la resistencia de bloque tardío de un pintura brillante 18 PVC con formulación en base en el aglomerante (i)

En este ejemplo, una unidad básica de cada material es el peso. Para una formulación particular de materiales, la formulación de material total es el peso de formulación del material es expresado como:

`mat_formula_wt (i)` es el peso del material (i) en la formulación.

El motor de formulación procesa una red de conocimiento que interrelaciona los materiales lo mismo que el conocimiento acerca de la formulación de producto efectivo y los procesos de fabricación. En el ejemplo aquí, la red de conocimiento de formulación incluye una representación del conocimiento de formulación:

El peso seco del material específico es:

$$\text{mat_dry_wt}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) * \text{mat_wt_solids}(i)$$

la contribución de volumen de un material específico
(i) en la pintura húmeda es:

$$\text{mat_wet_vol}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) / \text{mat_supplied_density}(i)$$

la contribución de volumen de un material específico
(i) en la pintura seca es:

$$\text{mat_dry_vol}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{mat_dry_density}(i)$$

el peso total de la pintura es la suma de los pesos
de material individual:

$$\text{tot_wt} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_formula_wt}(i)$$

el volumen total de la pintura es la suma de los
volúmenes húmedos de materiales individuales:

$$\text{tot_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_wet_vol}(i)$$

el volumen total seco de la pintura es la suma de los volúmenes en seco individuales:

$$\text{tot_dry_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

el volumen seco de pigmento en la pintura es una suma similar, aplicada solamente a los pigmentos:

$$\text{pig_dry_vol} = \sum_{\text{pigments}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

el peso seco del aglomerante la pintura es:

$$\text{dry_wt_binder} = \sum_{\text{all binders}} \text{mat_dry_wt}(i)$$

la fracción de aglomerante de un aglomerante específico(i) es:

$$\text{fract_bind_wt}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{dry_wt_binder}$$

Los sólidos de volumen de la formulación (VS) es:

$$\text{VS} = \text{tot_dry_vol} / \text{tot_vol}$$

El contenido de volumen de pigmento de la formulación (PVC) es:

$$\text{PVC} = \text{pig_dry_vol} / \text{tot_dry_vol}.$$

En algunos casos, el objeto de los materiales sobre las características de una formulación pueden ser representadas por una serie de fórmulas diferentes, en algunos casos, el objeto de los materiales sobre las características de una formulación pueden ser representadas por una serie de fórmulas diferentes, la fórmula particular a ser aplicada depende de la concentración del material en la formulación. Por ejemplo, la sujeción entre PVC y la resistencia al bloque puede depender de la concentración de PVC y puede ser expresada por el siguiente conjunto de relaciones:

tot PVC add	Block PVC
PVC < 30%	0
30% ≤ PVC ≤ 40%	(tot_PVC - 0,3) * 10
PVC > 40%	1

La contribución de aglomerante a la resistencia de bloque es:

$$\text{Bind_late_block_tot} = \sum_{i=\text{binders}} (\text{bind_late_block}(i) * \text{frac_bind_wt}(i))$$

La propiedad objetivo, bloque tardío, es:

$$\text{Late_block} = \text{bind_late_block_tot} + \text{block_PVC} * (10 - \text{bind_late_block_tot}).$$

El motor de formulación puede determinar las características de la fórmula, y puede ayudar a determinar una formulación modificada con base en un manuscrito de formulación de producto. El manuscrito de formulación de producto puede diseñar una receta (por ejemplo, una lista de materiales e ingredientes) que pueden ser usados para formular un producto, la restricciones sobre unos ingredientes particulares en la receta, opciones para la selección entre algunos materiales, y restricciones de producto de salida que es producido. Una lista de ejemplo de ingredientes puede incluir los siguientes ingredientes en una receta de formulación de pintura básica:

Tabla 3: Formulación de punto de partida

Material	Peso
Agua	5,00
Propilenglicol	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
Agua	20,00
Rhoplex HG-74D	529,00
Texanol	30,00
Acrysol RM-2020	40,00
Agua	121,00

Las propiedades esperadas de esta invención de punto de partida debe ser calculada por el motor de formulación usando la red de conocimiento de formulación de la figura 1 (según se expresó por el código de programa de la tabla 1). Estas propiedades de punto de partida son las siguientes:

Propiedad	valor
Peso total (kg)	1003,00
Volumen total (l)	833,95
Volumen de sólidos (%)	32,79
PVC (%)	18,28
Late Block (0 a 10)	7,00

Un usuario puede desear determinar una nueva formulación de pintura modificando la formulación de punto de partida con base en un conjunto de construcciones especificadas por el usuario. El manuscrito de la formulación de producto puede identificar las restricciones especificadas por el usuario tal como esta escogencia de materiales y las restricciones del nivel de material.

A una restricción de escogencia de material de los grupos específicos de materiales son, hasta algún grado, intercambiables. Sin embargo, las escogencias específicas entre un grupo pueden tener diferentes propiedades. El motor de formulación puede determinar los miembros específicos de un grupo que deberían ser seleccionados para satisfacer las restricciones de formulación especificadas por el usuario. La información de clasificación de material en la base de datos de materias primas puede ser usada para determinar materiales adecuados para incluir dentro de un grupo. Como un ejemplo, la base de datos de la tabla 2 identifica tres aglomerantes diferentes. Al modificar la formulación de punto de partida de la tabla 3, un usuario puede

especificar que el aglomerante ("Rhoplex HG-74D" en la tabla 3) puede ser alterado por el motor de formulación y puede ser uno de los tres aglomerantes (i) Rhoplex HG-74D, (ii) Rhoplex HG-95P o (iii) Rhoplex Multilobe 200. El usuario también puede especificar el nivel de material; (por ejemplo, "el peso del aglomerante está entre 400 y 600 kg inclusive). Para nuestro ejemplo, las restricciones adicionales siguientes son especificadas:

Restricción del nivel de agua:

Hagamos que el agua de la última alguna en la formulación esté entre 0 y 50 kg inclusive.

Otros materiales:

Hagamos que la escogencia de materiales o niveles de materiales en el punto de partida fijos a sus valores iniciales dados en la fórmula de la tabla 3.

En adición a especificar restricciones sobre los materiales de entrada, el usuario puede especificar restricciones objetivo para el producto formulado

(salida). En este ejemplo, esta descripciones son como sigue:

Hacer que el volumen de peso total sea cualquier valor (sin restricción);

Hacer que el volumen total esté entre 833 y 835 inclusive;

Hacer el volumen de sólidos entre 22,5% y 33,0% inclusive;

Hacer el PVC que sea menos que o igual a 18,5%; y

Hacer el Late Block mayor que o igual a 7,0.

Desde las restricciones de formulación de punto de partida, el sistema de formulación, usando el conocimiento de programa en la tabla 1, se puede concluir que los siguientes dos espacios de solución satisfacen al entrada especificada por el usuario y las restricciones de producto objetivo:

Solución # 1:

La solución #1 es una formulación en la cual el motor de formulación ha seleccionado Rhoplex HG-74D como

el aglomerante. El "espacio" de formulación resultante es como sigue:

Material	Peso min	Peso max
Agua	5,00	5,00
Propilenglicol	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
Agua	20,00	20,00
Rhoplex HG-74D	522,04	534,35
Texanol	30,00	30,00
Acrysol RM-2020	40,00	40,00
Agua	114,86	128,79

Las propiedades específicas de pintura producida de acuerdo a la solución #1 dependerá de los niveles específicos de materiales seleccionados y tendrá los siguientes rangos:

Propiedad	Valor min	valor max
Peso total (kg)	989,90	1016,14
Volumen total (l)	833,00	835,00
Sólidos en volumen (%)	32,50	33,00
PVC (%)	18,15	18,47
Late Block (0 a 10)	7,00	7,00

Solución 2

La solución #2 es una formulación en la cual el motor de formulación ha seleccionado Rhoplex HG-95P como el ligador. El espacio de formulación resultante es como sigue:

Material	Peso min	Peso max
Agua	5,00	5,00
Propilenglicol	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
Agua	20,00	20,00
Rhoplex HG-95P	502,94,04	514,80
Texanol	30,00	30,00
Acrysol RM-2020	40,00	40,00
Agua	147,35	160,53

Las propiedades específicas de una pintura producida de acuerdo a la solución #2 dependerán de los niveles de material específicos seleccionados y tendrán los siguientes rangos:

Propiedad	Valor min	valor max
Peso total (kg)	1003,29	1028,33
Volumen total (l)	833,00	835,00
Sólidos en	32,50	33,00

volumen (%)		
PVC (%)	18,15	18,47
Late Block (0 a 10)	9,00	9,00

Escogencias Rechazadas

El motor de formulación también determina que el ligador Rhoplex Multilobe 200 no puede satisfacer la restricción especificada. Por lo tanto, el motor de formulación rechaza el Rhoplex 29200 como un ligador. En el caso del Rhoplex Multilobe 200, la red de conocimiento de formulación puede determinarse, para las restricciones especificadas:

Bind_late_block=2

Fract_bind_wt=1

Block_PVC=0

Estos resultados en la conclusión que bind_late_block_tot=2 y que late_block=2. Esto no es un resultado válido debido a la restricción especificada que requiere que late_block sea al menos 7. Consecuentemente,

Rhoplex multilobe 200 se rechaza por el motor de formulación.

Como se ve del ejemplo anterior, se utiliza restricciones especificadas por el usuario, las formulaciones que cumplen con aquellas restricciones se pueden determinar. Sin embargo, las características de las soluciones de formulación determinada no pueden cubrir el espacio entero permitido por una restricción. Por ejemplo, aunque las restricciones iniciales indicaban que entre 400 y 600 kg de ligador puede ser incluido, si este rango fuera, de hecho, utilizado en las formulaciones de solución, se violarían otras restricciones. Para proporcionar guías de formulación adicional, el motor de formulación puede proporcionar restricciones con nivel de entrada revisada para asegurar que una solución de fórmula 100, de hecho, cumple las restricciones deseadas. En este ejemplo, el motor de formulación puede hacer las siguientes determinaciones:

- El ligador debe ser bien sea Rhoplex HG-74D o Rhoplex-HG95P.

- El peso del ligador debe estar entre 522,04 y 534,16 kg cuando se utiliza Rhoplex HG-74D y 502.94 a 514,61 cuando se utiliza Rhoplex HG-95P
- El peso del agua debe estar entre 116,01 y 127,48 cuando se utiliza Rhoplex HG-74D y 148,50 y 159,26 cuando se utiliza Rhoplex HG-95P.
- El peso total estará entre 1001,49 y 1016,22
- El volumen estará entre 833 y 835 (igual que la restricción de entrada)
- Los sólidos en volumen serán 32,50 y 32,97
- El PVC estará entre 18,21% y 18,46% (más estrecho que la entrada)
- El Late Block Resistance estará entre 7 y 9 (más estrecho que la entrada)

Si un usuario subsecuentemente restringe el Late Block Resistance adicionalmente para estar por encima de 8, el motor de formulación concluirá que el ligador correcto será Rhoplex HG-95P y las características del producto resultante tendrán restricciones numéricas expresadas anteriormente. De esta manera, el motor de formulación se puede utilizar para determinar los niveles apropiados y niveles de materiales que cumplan tanto las

restricciones de propiedad de entrada como de objetivo. Dependiendo de la complejidad de los problemas a ser resueltos, las implementaciones pueden utilizar números más grandes de propiedades de desempeño de pintura y materia prima y niveles.

El siguiente código muestra los detalles esenciales del texto de formulación del producto PROLOG IV que especifica la receta de formulación de pintura básica de la tabla 3, como también las restricciones permitidas en las secciones para formular una pintura que utiliza una receta básica.

```

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',_],
],[]).

```

Las ejecuciones pueden incluir un extremo frontal con interface gráfica de usuario para generar la entrada y código de pregunta precedente.

Implementación de la base de molienda

Además de la selección y determinación de los niveles de materiales, un motor de formulación se puede utilizar para determinar la elaboración, aplicación, y procesos de formulación a ser utilizados por un material particular. En el ejemplo que sigue, se utiliza la ejecución del motor de formulación para determinar las características de la base de molienda para utilizarse en preparación de un herbicida.

En la preparación de herbicidas para uso en aplicaciones agrícolas una de las etapas del proceso es la preparación de una base de molienda. La propiedad clave de la base de molienda final es la distribución del tamaño de partícula. La propiedad clave de la base de molienda fina es la distribución del tamaño de partícula, que tenía en gran manera otras propiedades clave de la formulación final tales como el perfil de viscosidad, la estabilidad, y la suspensibilidad. La distribución se

puede representar por medio del cincuentavo tamaño percentil y el noventavo tamaño percentil. El cincuentavo tamaño percentil es el tamaño para el cual el 50% del tamaño de las partículas es más pequeño. El noventavo tamaño percentil es el tamaño para el cual el 90% de las partículas son más pequeñas) (estos tamaños se representan mediante las variables ps_50_final y ps_90_final, respectivamente).

El tamaño de partícula final de una base de molienda se puede producir de la potencia del volumen específico utilizado, la densidad de los glóbulos en el molino, el método de procedimiento que utiliza el molino, el tiempo de molienda, la distribución del tamaño de partícula inicial, y un número de otras propiedades del equipo, el proceso y el material. En el conjunto de variables y ecuaciones que representan este tipo de conocimientos se expresa para una base de molienda de ingrediente activo simple adelante:

Base de datos del equipo

45

Una base de datos del equipo identifica el equipo de molienda en las propiedades asociadas. La base de datos del equipo puede incluir los siguientes campos de datos:

mill_type: nombre único del molino utilizado para moler la base de molienda

milling_powder_draw: potencia máxima utilizada por este tipo de molino

bead_type: nombre único del tipo de glóbulos utilizados

bead_density: densidad de los glóbulos utilizados

para este ejemplo, la base de datos del equipo se pobla como sigue:

mill_type	mill power draw (Watts)
Dynomill KD-15 (15 L)	11,250
Dynomill KD-50 (49 L)	18,750
Netzsche LMC 20 (20 L)	7,500
Netzsche LMC 60 (20 L)	18,750

bead type	bead Density (g/ml)
Arena	2,5
Vidrio - sin plomo	2,5
Pedruzco de pedernal	2,6
Vidrio - sin plomo	3,6
Oxido de Circonio (YTZ)	6,0
Carburo de Tungsteno	15,0

Base de datos del proceso

Una base de datos del proceso identifica un proceso de molienda particular y características de aquellos procesos. La base de datos del proceso puede incluir los siguientes campos de datos:

`mill_operation_type`: nombre único que identifica el método particular para correr un molino.

`d90_to_d50_ratio`: proporción esperada de 90^{vo} tamaño de percentil a 50^{vo} tamaño de percentil par el método particular para correr el molino.

Para este ejemplo, la base de datos del proceso se puede poblar como sigue:

<code>mill_operation_type</code>	<code>d90 to d50_ratio</code>
Recirculación continua	4,00
Un paso descrito	3,75
Dos pasos discretos	3,50
Tres pasos discretos	3,25
Cuatro o más pasos discretos	3,00

Base de Datos del Material

Una base de datos de material incluye características de las materias primas. La base de datos de los materiales puede incluir los siguientes campos de datos:

mat_name: nombre único del material en la formulación

mat_wt_solids: fracción de peso y diseño del material

mat_dry_density: densidad del material en la formulación seca

mat_supplied_density: densidad del material en su forma de suministro

tech_surface_energy: energía de superficie del material activo clínico en la base de molienda

ps_50_initial_ tamaño de partícula del material activo clínico en la base de molienda

para este ejemplo, la base de datos de los materiales se puebla como sigue:

mat_name	mat_wt_solids	mat_dry_density (g/ml)	mat_supplied_density (g/ml)	tech_surface_energy (J/m ²)	ps_50_initial (micrones)
Goal Tech	100%	1,45	1,45	0,04	15
Kelzan	100%	1,50	1,50		
Proxel GXL	25,3%	1,00	1,13		
agua	0%	1,00	1,00		

Las propiedades de una base de molienda preparada se pueden determinar, en parte, con base en un conjunto de propiedades iniciales asociadas con varias variables relacionadas con la elaboración. Estas variables pueden incluir las siguientes:

mat name	mat formula wt	mill type	bead type
bead size	mill operation type	milling time	bead_fill_fraction

Estos valores se pueden utilizar para calcular un conjunto de propiedades intermedias de la base de molienda. Las propiedades intermedias, y los cálculos para obtener estas propiedades, puede incluir las siguientes:

$$\text{mat_dry_wt}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) * \text{mat_wt_solids}(i)$$

$$\text{mat_dry_vol}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{mat_dry_density}(i)$$

```

mat_dry_vol(i)=mat_formula_wt(i)/mat_supplied_densit
y(i)

tot_dry_vol(i)millbase= $\Sigma_{all \text{ materials in millbase}}$ 
mat_supplied_density(i)

tot_vol_millbase= $\Sigma_{all \text{ materials in millbase}}$  mat_wet_vol(i)

tot_wt_millbase= $\Sigma_{all \text{ materials in millbase}}$  mat_formula_wt(i)

solids_factor_millbase=tot_dry_vol_millbase/tot_vol_
millbase

bead_density_factor=bead_density/2,5

milling_energy=milling_power_draw*milling_time

specific_milling_energy=milling_energy/tot_wt_millba
se

milling_efficiency=solids_factor_millbase*bead_densi
ty_factor*bead_fill_fraction*bead_size

area_to_diameter_factor_millbase=0.006*solids_factor
_millbase/tot_wt_millbase

surface_area_increase=(miling_efficiency*specific_mi
lling_energy)/tech_surface_energy

surface_area_50_0_millbase=1,000,000*area_to_diamet
er_factor_millbase/ps_50_initial

surface_area_50_final_millbase=surface_area_50_0_mil
lbase+surface_area_increase

```

los tamaños de partícula final se pueden calcular de las propiedades intermedias como sigue:

```
ps_50_final=1,000,000*area_to_diameter_factor_millbase/surface_area_50_final_millbase  
ps_90_final=ps_50_final*d90_to_d50_ratio
```

Estas relaciones se muestran en el código de programa de la figura 2 que ejecuta este ejemplo seguido de las enseñanzas del código de programa de la tabla 1. En este ejemplo, el conocimiento acerca de las características del material, el proceso y el equipo son interrelacionados. La escogencia del material y el nivel se representan mediante `material_name` y `mat_formula_wt`. La escogencia de los procesos y los parámetros son dados mediante `mill_operation_type` y las escogencias del tiempo de molienda y `bead_fill_fraction`. Las escogencias del equipo y los parámetros son dadas mediante las escogencias `mill_type` y `bead_type` y el parámetro `bead_size`.

El uso del conocimiento de la formulación anteriormente descrita y la base de datos será ahora descrita. En el ejemplo que sigue, la red de conocimiento

de una formulación se utiliza para determinar los procesos y el equipo que pueden dar como resultado tamaños de partícula objetivo deseadas para ps_50_final y PS_90_final.

El uso de una red de conocimiento de formulación de base de molienda de iniciar con una selección de usuario de un conjunto de decisiones iniciales. Para este ejemplo, las restricciones seleccionadas por el usuario incluye le material siguiente, la base de molienda objetivo, la escogencia de equipo, el parámetro del equipo, la escogencia del proceso, y las restricciones de parámetro de proceso:

Restricciones del material especificado por el usuario:

material_name	mat_formula_wt min (kg)	mat_formula_wt max (kg)
Goal Tech	49,95	49,95
Kelzan	0,05	0,05
Proxel GXL	0,05	0,05
agua	49,45	49,45

Restricciones del material de molienda objetivo
especificado por el usuario:

Propiedad	Mínimo (micras)	Máximo (micras)
ps 50 final	0,9	1,1
ps 90 final		3,5

Restricciones de escogencia de equipos especificados
por usuario:

Tipo de equipo	escogencias permitidas
mill type	Dynomill KD-15 (15L)
Bead_type	Vidrio - sin plomo Vidrio - plomo Oxido de circonio (YTZ)

Restricción de parámetro de equipo especificada por
usuario:

Propiedad	Mínimo (mm)	Máximo (mm)
Bead size	1	1

Restricciones de escogencia de proceso especificada
por usuario

Tipo de proceso	Escogencias permitidas
mill_operation_type	Recirculación continua Un paso discreto Dos pasos discretos Tres pasos discretos Cuatro o más pasos discretos

Restricciones de parámetro de proceso especificada por usuario

Propiedad	Mínimo	Máximo
milling_time (minutes)	30	90
bead fill fraction	0,8	0,8

Dadas estas restricciones, las bases de datos y las relaciones del motor de formulación pueden determinar biológicamente el proceso necesario para lograr los tamaños de partícula objetivo. Con base en las fórmulas descritas y las restricciones, el motor de la formulación puede alcanzar la siguiente conclusión con respecto al tipo de operación de molienda en el tiempo de operación:

Conclusión del tipo de operación de molienda:

mill operation type	Resultado
Recirculación continua	(sin solución)
Un paso discreto	(sin solución)
Dos pasos discretos	Puede cumplir restricciones
Tres pasos discretos	Puede cumplir restricciones
Cuatro o más pasos discretos	Puede cumplir restricciones

Conclusión tiempo de molienda (rango disponible antes de fijar el mill_operation_type)

Propiedad	Mínimo (minutos)	Máximo (minutos)
milling time	79	90

Para un tipo de glóbulo particular, el rango del tiempo de molienda dependerá del tipo de operación de molido. Por ejemplo, si el tipo de glóbulo está restringida a óxido de circonio (YTZ), el rango de tiempo de molienda disponibles será como sigue:

mill_operation_type seleccionado	milling_time mínimo (minutos)	milling_time máximo (minutos)
Recirculación continua	(sin solución)	(sin solución)
Un paso discreto	(sin solución)	(sin solución)
Dos pasos	88	90

discretos		
Tres pasos discretos	81	90
Cuatro o más pasos discretos	79	90

De esta manera, un proceso de escogencia para cumplir las restricciones objetivas especificadas por el usuario es utilizar glóbulos de óxido de circonio (YTZ) y un molino que opera utilizando tres pasos discretos para un tiempo de molienda de 68 minutos. Esto produce un ps_{50_final} de 1,00 micras y un ps_{09_final} de 3,24 micras. Otras escogencias dentro del espacio de solución también cumplirán las restricciones especificadas por el usuario.

La invención puede ejecutar en un circuito electrónico digital, o en un computador, un firmware, un soporte lógico, o en combinaciones de ellos. El aparato de la invención se puede ejecutar en un producto de programa de computador tangiblemente acondicionado en un dispositivo de almacenamiento de uno por máquina par la ejecución mediante un procesador programable, y las etapa del método de la invención se pueden desarrollar mediante un procesador programable que ejecuta un programa de

instrucciones para desarrollar restricciones de la invención al operar sobre los datos de entrada y generar los de salida. La invención puede ser ventajosamente implementada en una o más formas de computador que son ejecutables sobre un sistema programable que incluye al menos un procesador programable acoplado para recibir datos e instrucciones a, un sistema de almacenamiento de datos, al menos un dispositivo de entrada, al menos un dispositivo de salida. Cada programa de computador puede ser incrementado en un recibimiento de alto nivel o un lenguaje de programación orientado por objetivo, o en un lenguaje "asémil" o de máquina si se desea; y en cualquier caso, el lenguaje puede ser un lenguaje compilado e interpretado. Los procesadores adecuados incluyen, por vía de ejemplo, tanto los procesadores de propósito general como especial. De manera general, un procesador recibirá instrucciones y datos de la memoria de solo lectura y/o de la memoria de acceso aleatorio. Si los dispositivos de almacenamiento adecuados para adecuarse tangiblemente a instrucciones de programa de computador y datos incluyen todas la forma de memoria no volátil, incluyendo por ejemplo dispositivos de memoria con semiconductor, tales como EPROM, EEPROM, y dispositivos de memoria de destello; discos magnéticos

tales como discos duros internos y discos removibles; discos magneto-ópticos; y discos de CD-ROM. Cualquiera de los anteriores puede ser suministrado, o incorporado en ASIC especialmente diseñado (circuitos integrados de aplicación específica).

Un número de modalidades de la presente invención son descritas. Sin embargo, se debe entender que varias modificaciones se pueden hacer sin apartarse del espíritu y alcance de la invención. Por ejemplo, se pueden utilizar otros lenguajes de programa para ejecutar un motor de conocimiento de formulación se puede utilizar con una interface basada en la red. El material, los procesos y otros tipos de datos se pueden almacenar en una base de datos externa, tal como la base de datos basada en lenguaje con pregunta estructurada (SQL), una hoja amplia, y otros sistemas de almacenamiento de datos y accesados por medio de código de programa que ejecuta el motor de formulación utilizando interfaces de programación con aplicación estándar (AAPI).

La invención de la formulación descrita aquí se puede utilizar para direccionar problemas de formulación en una variedad de industrias. Las industrias que se

pueden beneficiar de la invención incluyen las de preparación de alimentos, petróleo o cosméticos, construcción, electrónica, plástico, manufactura de material, y ambiental. En la industria de preparación de alimentos, una formulación se puede implementar para reformular la combinación, cocción, y procesamiento de los ingredientes alimenticios así como también reformular los procesos tales como el de fermentación y combinación de vino o cerveza. La industria de la construcción, los procesos utilizados para producir productos de construcción tales como la composición del cemento, arena, y otros materiales sólidos con agua para producir un mortero que pueden reformular. En la industria del petróleo, las mezclas químicas (por ejemplo, procesamiento y mezcla de aceites básicos y aditivos para preparar aceite motor pueden ser reformulados). En la industria del plástico la formulación de un polímero moldeado provenientes de glóbulos de polímero y materiales de aditivo plástico (modificadores de impacto, pigmentos, etc.). En la industria de manejo ambiental, el tratamiento de aguas que utiliza resinas, decantación, y otros procesos se pueden reformular. En general todos estos ejemplos involucran la formulación de uno o más materiales compuestos de uno o más materiales de

ingredientes, junto con información sobre las etapas del proceso, condiciones de equipamiento utilizado en la preparación. En las reivindicaciones que siguen, estos ingredientes y procesos se denominan como componentes de formulación. De acuerdo con esto, otras modalidades están dentro del alcance de las siguientes reivindicaciones.

REIVINDICACIONES

1. Un método ejecutado en un computador para formular un producto, el método comprende:

Recibir un texto de formulación de un producto, el texto comprende:

Una opción de selección de componente, la opción de selección comprende una pluralidad de componentes de formulación,

Una restricción de componente de formulación que identifica un rango asociado con una propiedad de componente de formulación, y

Una restricción objetiva; y

Procesar el texto de formulación del producto para determinar una recolección de componentes de formulación que se pueden utilizar para producir un producto, el producto tiene una primer propiedad de acuerdo con una restricción objetivo, en donde la

recolección comprende le primer componente de la formulación y el procesamiento de texto comprende:

Determinar el primero de los conjuntos de los componente de formulación para la inclusión en la recolección; y

Determinar y permitir el rango asociado con el primer componente de formulación en la recolección, el rango permitido siendo consecuente con la restricción del componente de formulación.

2. El método de la reivindicación 1 en donde el componente de procesamiento del texto comprende el procesamiento con base en una red de conocimiento de formulación, la red de conocimiento de formulación interrelaciona propiedades de los componentes de formulación para las propiedades objetivo.

3. El método de la reivindicación 2 en donde el procesamiento de texto comprende además la recuperación de las propiedades del componente de formulación de una base de datos.

4. El método de la reivindicación 3 en donde las propiedades del componente de formulación recuperadas de la base de datos comprende una propiedad de un componente de formulación que comprende una materia prima propiedad de un componente de formulación que comprende un proceso de manufactura.
5. El método de la reivindicación 1 en donde el procesamiento del texto comprende además excluir al menos uno de los otros conjuntos de componentes de formulación de la conexión.
6. El método de la reivindicación 1 en donde el primer componente de la formulación comprende un componente de la formulación en el primer conjunto.
7. El método de la reivindicación 1 en donde el primer componente de la formulación comprende un componente de la formulación que no está en el primer conjunto.

8. El método de la reivindicación 1 en donde el rango identificado mediante la restricción de la formulación comprende el rango permitido y un rango no permisible y determinar el rango permitido comprende determinar un rango de valores que posibilitan la formulación del producto de acuerdo con la restricción objetivo.

9. El método de la reivindicación 1 en donde:

La restricción objetivo comprende un rango de valores que comprenden valores alcanzables de la primer propiedad y valores no alcanzables de la primer propiedad, y el procesamiento del texto comprende determinar los valores alcanzables y los valores no alcanzables.

10. Un sistema de computador para formular un producto químico, el sistema comprende:

Un procesador acoplado a un dispositivo de entrada de usuario;

Una base de datos acoplada al procesador y que comprende instrucciones para configurar el procesador para:

Recibir un texto de formulación de producto, el texto comprende:

Una opción de selección de componente, la opción de selección comprende una pluralidad de conjuntos de componentes de formulación,

Una restricción de componentes de formulación que identifica un rango asociado con una propiedad de componente de formulación, y

Una construcción objetivo; y

Procesar el texto de formulación de producto para determinar una conexión de componentes de formulación que se pueden utilizar para producir un producto, el producto tiene una primer propiedad de acuerdo con la restricción objetivo, en donde la conexión comprende el primer componente de

65

formulación y las instrucciones para procesar y el texto comprende instrucciones para:

Determinar el primero de los conjuntos de los componentes de formulación para la inclusión de la conexión; y

Determinar un rango permitido asociado con el primer componente de formulación en la conexión, el rango permitido es consecuente con la restricción del componente de formulación.

RESUMEN

Un método ejecutado en computadora para formular un producto (por ejemplo un producto químico) que incluye recibir un peso de formulación de producto que guía la formulación de un producto desde un número de diferentes componentes. El texto puede, por ejemplo, establecer los componentes requeridos opcionales y los grupos de componentes alternativos relacionados. Proporcionar para tal guía, el texto incluye (i) una opción de selección de componente que identifica conjuntos de componentes de formulación, (ii) al menos una restricción para identificar una rango numérico asociado con una propiedad de uno de los componentes de la formulación, y (iii) una restricción objetivo. El texto de la formulación de producto se procesa para determinar una colección de componentes de formulación que se pueden utilizar para producir el producto de tal forma que una o más de las propiedades del producto cumple con las restricciones objetivas asociadas. El procesamiento del texto también incluye seleccionar de entre los componentes de formulación opcionales. Esta selección se puede desarrollar al determinar conjuntos de componentes de formulación a ser utilizados en la formulación del

producto y determinar el rango permitido asociado con los componentes de formulación. Los rangos permitidos posibilitan al proyecto formulado cumplir con la o las restricciones objetivo.

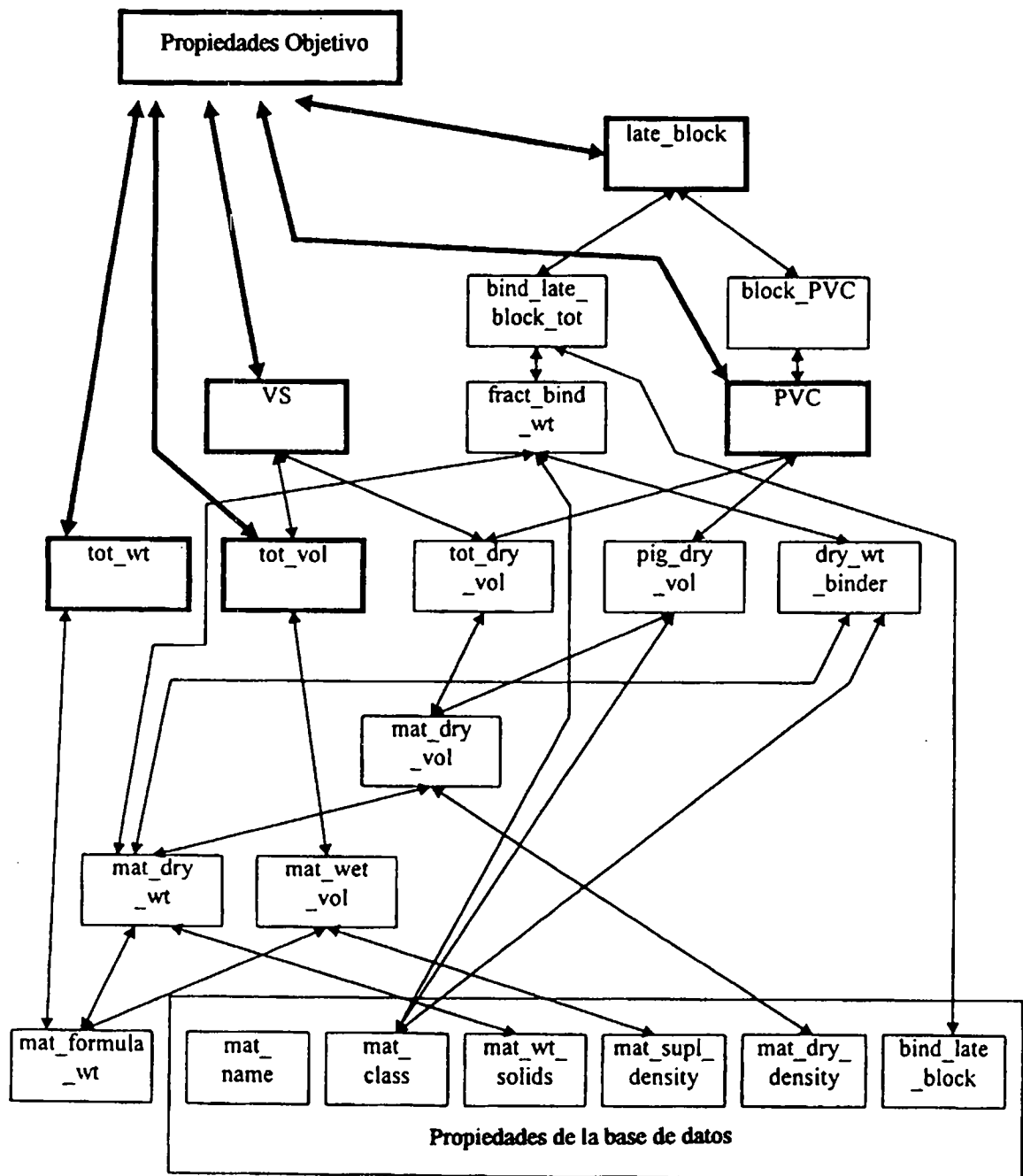


Fig. 1

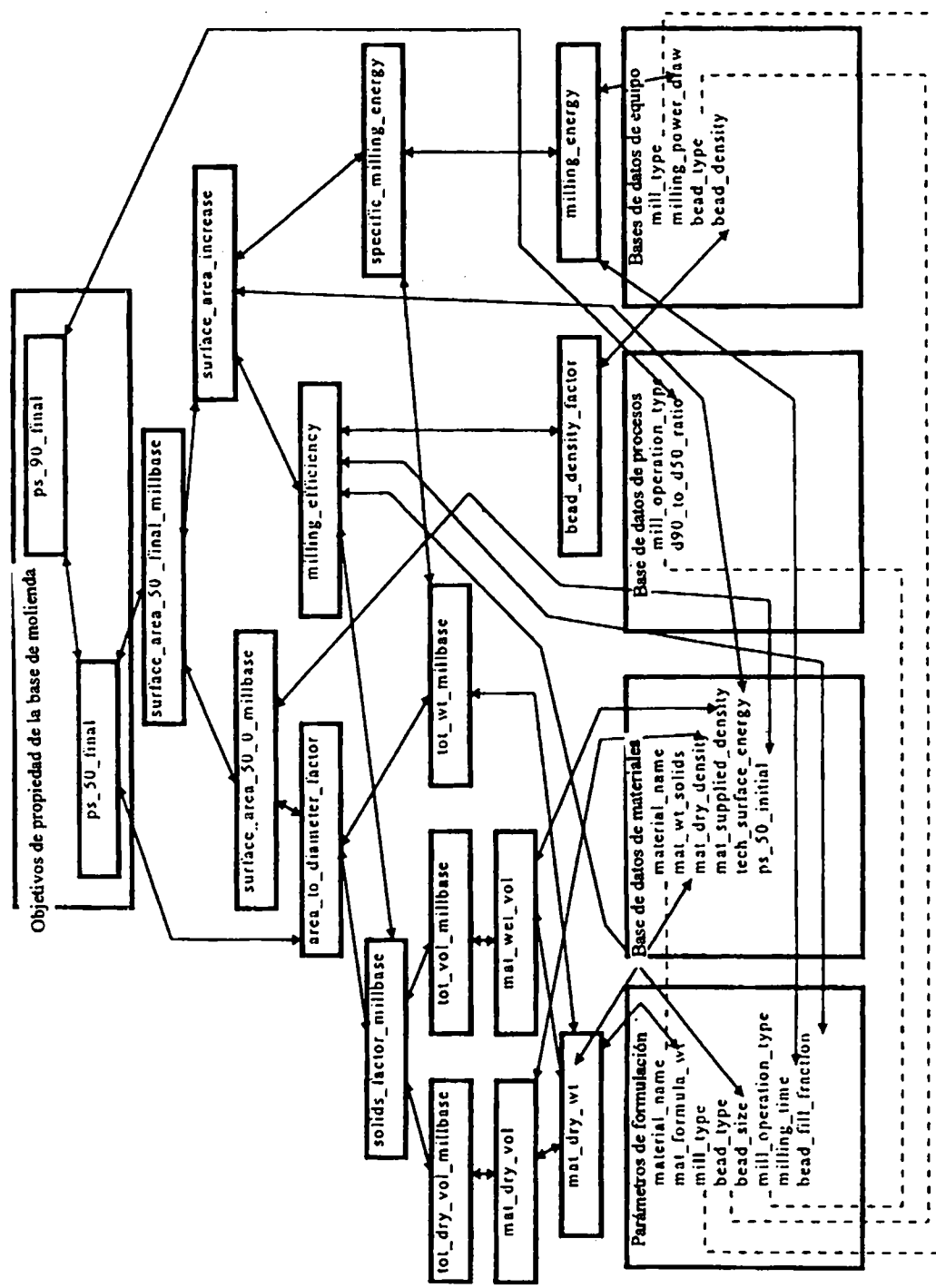


Fig. 2

AVELIER

ABOGADOS

EDIFICIO SISKI
CARRERA 4ª, N° 72-35
BOGOTÁ, 8 - COLOMBIA

CONSULADO DE PRIMERIA
DE COLOMBIA

APR 29 1987

REPRESENTACION Y PODER

FILADELPHIA

Yo (nosotros), abajo firmado(s)
William E. Lambert III, Secretario
Adjunto, de ROHM AND HAAS COMPANY
domiciliado(s) en Independence Mall West
Filadelfia, PA 19105, Estados Unidos
de América

por el presente nombramos a GERMAN CAVELIER, tpa. 832; GONZALO PERDOMO, tpa. 831; ERNESTO CAVELIER, tpa. 11519; y EMILIO FERRERO, tpa. 31929; domiciliados en la Carrera 4ª N° 72-35, Bogotá, Colombia, en obediencia a lo dispuesto en el parágrafo 1º del Artículo 543 del Código de Comercio, el primero como principal y los demás como suplentes, en su orden, como nuestros representantes en todos los asuntos de propiedad industrial con facultad para recibir notificaciones y nombrar apoderados judiciales o extrajudiciales. El primer representante suplente reemplazará al principal en caso de ausencia o impedimento temporal o definitivo de aquél. La misma regla se aplicará cuando el segundo representante suplente haya de reemplazar al primero, o el tercero al segundo. En tales casos, el representante principal, o el primero, o segundo suplente, en su caso, o ambos, declararán su intención de no ejercer la representación mediante declaración autenticada por Notario Público en Colombia, o por Notario u otro Funcionario Público, o Cónsul de Colombia, en el extranjero; y si se tratare de impedimento, con el certificado respectivo. Si alguno de los nombrados faltare definitivamente, el siguiente tomará su lugar. Cuando cesare la ausencia o impedimento del representante principal, o de su primero o segundo suplente, en su caso, podrán ejercer la representación, en su orden, uno u otros según el caso, asumiéndola por el solo hecho de ejercerla, cesando en ese momento el ejercicio de la representación por el primero, segundo o tercer suplente en su caso.

Además, y bajo las mismas reglas, conferimos poder a los abogados arriba nombrados, para obtener la protección de mi (nuestra) propiedad industrial y contra la competencia desleal, a cuyo efecto autorizo(amos) a los dichos apoderados para que me(nos) representen ante cualesquiera entidades o personas, ejerzan o no jurisdicción, especialmente ante las del orden administrativo, contencioso-administrativo y judicial, en todo lo concerniente a los siguientes asuntos: a) Obtención de patentes de invención, modelos y dibujos industriales; el registro de marcas de fábrica, colectivas, defensivas y de servicios; el depósito de nombres comerciales y enseñanzas; su renovación, traspaso, cambio de nombre o domicilio, cancelación voluntaria; y el registro de licencias de uso de esos derechos; b) Las acciones de oposición, cancelación, nulidad, medidas cautelares, concesión de licencias y en general los juicios civiles, penales, administrativos o contencioso-administrativos relacionados con estos derechos; acciones y juicios que promovamos o se nos promuevan. Y para que en todos los asuntos arriba determinados, puedan sustituir este mandato, transigir, desistir, cancelar, recibir, renunciar, y ratificar los actos hechos por agentes oficiosos.

Dado y firmado hoy 9 de abril de 1987

en Filadelfia, PA

William E. Lambert III

Assistant Secretary

(Notary should execute on other side)

(Consular legalization necessary).

For patents, utility designs, trademarks, service marks, commercial names, ensings.

Para patentes, modelos y dibujos industriales, marcas de fábrica y de servicio, nombres comerciales y enseñanzas.

REPRESENTATION AND
POWER OF ATTORNEY

I (we), the undersigned William E. Lambert III
Assistant Secretary

of Rohm and Haas Company
Independence Mall West
Philadelphia, PA 19105 U.S.A.

in due compliance with the terms of paragraph 1st. of Article 543 of the Commercial Code, do hereby appoint GERMAN CAVELIER, tpa. 832; GONZALO PERDOMO, tpa. 831; ERNESTO CAVELIER, tpa. 11519; and EMILIO FERRERO, tpa. 31929; domiciled at Carrera 4ª N° 72-35, Bogotá, Colombia, the first as principal and the others as alternates, in the order of their appointment, as our representatives for all industrial property matters with faculty to receive notifications and to appoint attorneys in and out of Court. The first alternate shall replace the principal in case of this absence or of temporal or definitive impediment. The same rule will apply when the second alternate representative is to replace the first one, or when the third is to replace the second. In such cases, the principal representative, or the first or second alternates in their turn, or both of them, shall state their intention not to act as representatives through a declaration given before a Notary Public in Colombia, or before a Notary or another Public Official or a Colombian Consul abroad; and in case of impediment, the appropriate certificate shall suffice. If any of the appointees were to be definitely absent, the following alternate shall take his place. When the absence or impediment of the principal representative, or of the first or second alternate in their turn ceases, the representation can be taken again in their sequence, by the principal, the first or second alternate depending on case, and the mere fact of its exercise will suffice. The exercise of the representation by the first, second or third alternates in their turn shall end at such time. In addition, we grant a Power of Attorney in favor of the above-named attorneys, so that they may obtain the protection of my (our) industrial property and against the unfair competition, for which purpose I (we) authorize the said attorneys to represent me (us) before any authorities, persons, with or without jurisdiction, specially those administrative, administrative contentious and judicial, in all matters concerning the following: a) Obtainment of patents, models and designs, the registration of trademarks, collective, defensive and service marks; the deposit of commercial names and ensings; its renewal, assignment, change of name or domicile, voluntary cancellation; and the registration of licenses of use of the above rights; b) Actions of opposition, cancellation, nullity, infringement, granting of licenses; and in general the civil, penal, and administrative suits relating to those rights; actions and suits instituted by me (us) or against me (us). And that in all the above matters they may substitute this Power of Attorney, compromise, desist, cancel, receive, resign, and ratify acts done by representatives without a power of attorney.

Given and signed this 9th day of April, 1987

in Philadelphia, PA

TRADUCCION OFICIAL No. 107/87
ALICIA GROOT
INTERPRETE OFICIAL
RESOLUCION No. 2193, ABRIL 17, 1959
DEL MINISTERIO DE JUSTICIA.

CERTIFICADO NOTARIAL (INDIVIDUO)

A los 3 días del mes de de 19
ante mí, Notario Público de
compareció(eron) personalmente

a quien(es) doy fe de conocer y me consta que es (son)
la(s) persona(s) firmante(s) del documento que pre-
cede, y quien(es) tiene(n) capacidad legal para otor-
garlo.

Notary Public (Notario Público)

CERTIFICADO NOTARIAL (SOCIEDAD)

Hoy, 9 de abril de 1987
compareció(eron) ante mí William E.
Lambert III

a quien(es) conozco personalmente y que firma(n)
este documento en representación de la Sociedad
/Compañía denominada Rohm and Haas

Company

Certifico:

1. Que he visto los siguientes documentos:

- Artículos de Constitución Confirma-
dos el 25 de abril de 1977 y refor-
mados el 5 de mayo de 1980.
- Estatutos confirmados el 3 de enero, 1977,
y reformados el 1 de mayo, 1978.
- Acta de la Reunión de Junta Directiva, Dic.

2. Que dichos documentos prueban lo siguiente 1983

2.1. Que Rohm and Haas Company
es una Sociedad/Compañía legalmente constituida y
existente de acuerdo con las leyes del Estado de
Delaware

2.2. Que el domicilio de dicha Sociedad/Compañía
es Filadelfia, Pensilvania

2.3. Que el objeto u objetos para los cuales se otorga
el presente poder están comprendidos dentro del ob-
jeto social de la mencionada Sociedad/Compañía.

2.4. Que el Sr. William E. Lambert III

está(n) autorizado(s) para otorgar el presente Poder.

Ciudad Filadelfia

Estado Pensilvania

Hoy 9 de abril

de 1987

Notario Público — Notary Public

* Los documentos deben identificarse con fecha y origen.

NOTARIAL CERTIFICATE (INDIVIDUAL)

On this day of 19
before me, a Notary Public of
personally appeared

to me known, and known to me to be the person(s)
who executed that foregoing document, and who has
(have) legal capacity to execute it.

NOTARIAL CERTIFICATE (CORPORATION)

On this 9 day of April 1987
appeared before me William E. Lambert III

who(m) I know personally and who(m) signed this do-
cument as representative(s) of the Corporation/Com-
pany named Rohm and Haas Company

I Certify:

- That I have seen the following documents*:
a. Articles of Incorporation as Restated
April 25, 1977 and as Amended May 5, 1980

- Bylaws as restated January 3, 1977
and as amended May 1, 1978
- Minutes of Board of Directors Meeting
December 5, 1983

- That the above documents duly prove the follow-
ing:

2.1. That Rohm and Haas Company
is a Corporation/Company legally constituted and in
existence in accordance with the laws of the
State of Delaware

2.2. That the domicile of said Corporation/Company is
Philadelphia, Pennsylvania

2.3. That the purpose of purposes for which the pre-
sent Power of Attorney is granted are comprised
within the corporation purposes set forth in the char-
ter of the mentioned Corporation/Company.

2.4. That Mr. William E. Lambert III

is(are) authorized to grant the present Power of
Attorney.

City Philadelphia

State Pennsylvania

This 9 day of APRIL 1987

Elaine Sherman

* Documents must be identified with date and origin.

ELAINE SHERMAN
Notary Public, Philadelphia
Philadelphia County

My Commission Expires May 26, 1988

TRADUCCION OFICIAL No. 107/87

AUCIA GROOT

INTERPRETE OFICIAL

RESOLUCION No. 2195, ABRIL 17, 1980
DEL MINISTERIO DE JUSTICIA.

CONSULADO DE COLOMBIA

Filadelfia, Pennsylvania
Estados Unidos de America

1 2 5 1 2 7



Estados Unidos de América

COCCION OFICIAL No. 107/87

AGENCIA GROOT

INTERPRETE OFICIAL

RESOLUCION No. 2155, ABRIL 12, 1969

DEL MINISTERIO DE JUSTICIA

James

CAVELIER - ABOGADOS

No.

4-29-8

James J. Haggerty

El Consulado de Colombia CERTIFICA que

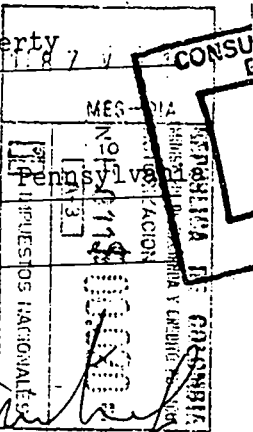
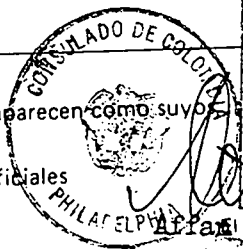
que autoriza el documento adjunto, ejercia legalmente en la fecha

allí expresada las funciones de Secretario de Estado de

y que la firma y sello que en el documento aparecen como suyos

son los que usa y acostumbra en sus actos oficiales

El Consulado no asume responsabilidad por el contenido de los documentos de los interesados.



COMO NOTARIO SEXTO DEL CIRCULO DE SANTAFE
DE BOGOTA, HAGO CONSTAR QUE ESTA COPIA FO
TOSTATICA COINCIDE CON EL ORIGINAL QUE HE
TENIDO A LA VISTA

22 MAY 2001

JUAN MANUEL BOTERO MEDINA
NOTARIO

MINISTERIO DE AGRICULTURA Y FOMENTO
 LEGALIZA BOGOTÁ
 BOGOTÁ MAYO 1987
 HACE CONSTAR 82260
 Señor
Affair Brito
 En la ciudad de Bogotá, D.C., a los 17 días del mes de mayo de 1987, el suscrito, en uso de las funciones que le son atribuidas,

[Signature]

ENADUCCION OFICIAL No. 107/87
 ALICIA GROOT
 INTERPRETE OFICIAL
 RESOLUCION No. 2195, ABRIL 17, 1986
 DEL MINISTERIO DE JUSTICIA.

[Stamp: MINISTERIO DE AGRICULTURA Y FOMENTO]
[Stamp: LEGALIZA BOGOTÁ]
[Stamp: BOGOTÁ]

COMO NOTARIO SEXTO DEL CÍRCULO DE SANTAFÉ DE BOGOTÁ, HAGO CONSTAR QUE ESTA COPIA FOTOSTÁTICA COINCIDE CON EL ORIGINAL QUE HE TENIDO A LA VISTA
 22 MAY 2001
 JUAN M.

COMMONWEALTH OF PENNSYLVANIA
DEPARTMENT OF STATE

1-C N° 26068

OFFICE OF THE SECRETARY OF THE COMMONWEALTH

Harrisburg, April 23, 1987

Pennsylvania, ss:

I, JAMES J. HAGGERTY, Secretary of the Commonwealth of Pennsylvania, custodian of the Great Seal of Pennsylvania and of the records showing the appointment of Notaries Public within said State.

DO HEREBY CERTIFY, That

ELAINE SHERMAN

whose official attestation appears upon the annexed instrument, was, at the time of signing the same, an acting NOTARY PUBLIC in and for the Commonwealth of Pennsylvania, U. S. A., residing in the

CITY OF PHILADELPHIA, PHILADELPHIA COUNTY

duly appointed, commissioned and qualified, and, as such officer had power within said Commonwealth, to administer oaths and affirmations, to make declarations and protests, take depositions and affidavits, take and receive the acknowledgment or proof of all deeds, conveyances, mortgages and other instruments of writing, touching or concerning any lands, tenements or hereditaments situate, lying or being in any part of said State, receive the proof or acknowledgment of all instruments of writing relating to commerce or navigation, letters of attorney, and such other writings as have been usually proved or acknowledged before notaries within said Commonwealth, etc., according to law, in all matters belonging or incident to the exercise of the notarial office, and accordingly FULL FAITH AND CREDIT are due and ought to be given to the official acts of said notary: That I verily believe the seal and the signature attesting the same are genuine.



COPIA NOTARIO SEXTO DEL CIRCULO DE NOTARIOS DE BOGOTA. HAGO CONSTAR QUE ESTA COPIA ESTADISTICA COINCIDE CON EL ORIGINAL QUE ME FUE ENVIADO A LA VISTA

22 MAY 20 1987

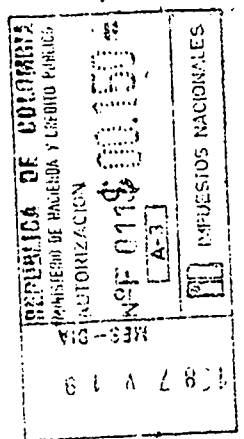
JUAN MANUEL BOTEIRO MEDINA
NOTARIO

FILADELFIA

IN TESTIMONY WHEREOF, I have
hereunto set my hand and caused the
Great Seal of the State to be affixed,
the day and year above written

James J. Haggerty
Secretary of the Commonwealth

TRADUCCION OFICIAL No. 107187
ALICIA GARCIA
INTERPRETE OFICIAL
RESOLUCION No. 2153, ABRIL 17, 1988
DEL MINISTERIO DE JUSTICIA



TRADUCCION OFICIAL No. 107/87 de un documento escrito en Inglés, el cual para su identificación se sella con el sello del traductor lo mismo que la presente. ----- Autenticaciones que se hallan a continuación de un documento de Representación y Poder otorgado por la sociedad ROHM AND HAAS COMPANY a los doctores GERMAN CAVELIER, GONZALO PERDOMO, ERNESTO CAVELIER y EMILIO FERRERO.

Dado y firmado el día 9 de abril de 1987, en Filadelfia, Pensilvania.

(firmado) (firma ilegible)

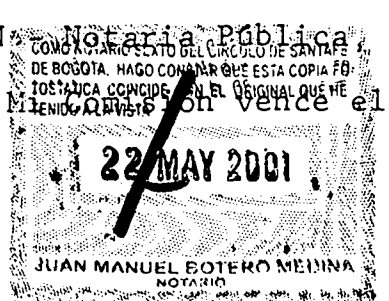
William E. Lambert III

Secretario Adjunto

Al dorso, escrito en Inglés y en Español, Certificado Notarial (Sociedad) referente a la firma de William E. Lambert III, en representación de la sociedad ROHM AND HAAS COMPANY. Otorgado en la Ciudad de Filadelfia, Estado de Pensilvania, el día 9 de abril de 1987.

Notario Público (firmado) Elaine Sherman

Hay un sello que dice: ELAINE SHERMAN Filadelfia - Condado de Filadelfia - 26 de mayo de 1988.



Hay un sello en relieve, ilegible.

Anexo hay un certificado que dice:

ESTADO DE PENSILVANIA

DEPARTAMENTO DE ESTADO

1-C No. 26068

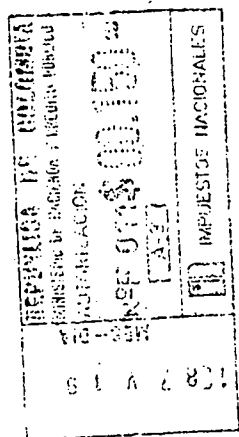
OFICINA DEL SECRETARIO DEL ESTADO

Harrisburg, Abril 23 de 1987

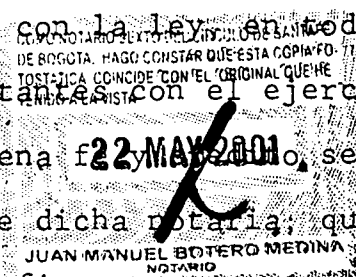
Pensilvania, ss:

Yo, JAMES J. HAGGERTY, Secretario del Estado de Pensilvania, custodio del Gran Sello de Pensilvania y de los archivos que muestran el nombramiento de Notarios Públicos

28



en dicho Estado, POR MEDIO DEL PRESENTE CERTIFICO, que ELAINE SHERMAN, cuyo testimonio oficial aparece en el instrumento adjunto, era, en el momento de firmarlo, NOTARIA PUBLICA en ejercicio en el Estado de Pensilvania y para el mismo, Estados Unidos de América, domiciliada en la Ciudad de Filadelfia, Condado de Filadelfia, debidamente nombrada, comisionada y habilitada, y, como tal funcionaria facultada en dicho Estado para administrar juramentos y afirmaciones, para hacer declaraciones y protestas, recibir declaraciones y testimonios, recibir el reconocimiento o prueba de todas las escrituras, traspasos, hipotecas y demás instrumentos escritos, que conciernan o se relacionen con tierras, tenencias o herencias situadas, localizadas o que se encuentren en cualquier parte de dicho Estado, recibir la prueba o reconocimiento de todos los instrumentos escritos que se relacionen con comercio o navegación, poderes, y otros escritos que usualmente hayan sido probados o reconocidos ante notarios en dicho Estado, etc., de conformidad con la ley en todos los asuntos que pertenezcan o concomitan con el ejercicio de las notarías, y de conformidad, plena y entera, se dan y deben darse a los actos oficiales de dicha notaría, que verdaderamente creo que el sello y la firma que autentican el documento son auténticos.



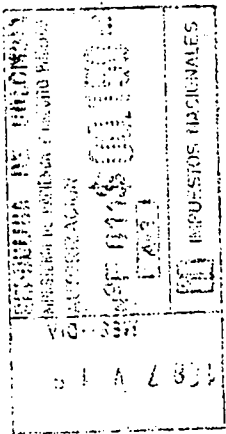
EN TESTIMONIO DE LO CUAL, he firmado el presente y he hecho poner el Gran Sello del Estado, el día y año escritos anteriormente.

(firmado) James J. Haggerty

Secretario del Estado

Adherido hay un sello en relieve (oblea dorada), que dice: SELLO DEL ESTADO DE PENSILVANIA.

TRADUCCION OFICIAL No. 107/87
AUCIA GROOT
INTERPRETE OFICIAL
RESOLUCION No. 2192, ABRIL 17, 1969
DEL MINISTERIO DE JUSTICIA.



En español, legalizaciones de la firma que antecede, hasta por el Ministerio de Relaciones Exteriores de la República de Colombia, bajo el Número 82260, de fecha 14 de mayo de 1987.

Adherida y debidamente anulada, estampilla del Servicio Exterior de Colombia, por un valor de Cinco pesos (\$5.00).

Pagado el Impuesto de Timbre, por máquina registradora, por un valor de Veinte pesos (\$20.00).

ES TRADUCCION FIEL Y COMPLETA del documento en referencia.

Bogotá, Mayo 19 de 1987.

AG/c.

Alicia Groot

TRADUCCION OFICIAL No. 107/87
ALICIA GROOT
INTERPRETE OFICIAL
RESOLUCION No. 2195, ABRIL 17, 1969
DEL MINISTERIO DE JUSTICIA.

COMO NOTARIO SEXTO DE BOGOTA
HAGO CONSTAR QUE LA FIRMA
QUE AUTORIZA ESTE DOCUMENTO
Y QUE DICE:

Alicia Groot

ES AUTENTICA
BOGOTA, D. E.



COMO NOTARIO SEXTO DEL CIRCUITO DE SANTAFE DE BOGOTA, HAGO CONSTAR QUE ESTA COPIA FOTOSTATICA COINCIDE CON EL ORIGINAL QUE HE TENIDO A LA VISTA

22 MAY 1987

JUAN MANUEL BOTERO MEDINA
NOTARIO

NO SE ASUME
RESPONSABILIDAD DEL TEXTO

1987 DIC 11 P 277
JEFE DE LEGALIZACIONES
SANTAFE DE BOGOTA D.C.

COPIA FIRMADA POR EL
DOCUMENTO DESPUES DE
LAS FUNCIONES INDICADAS

CAVELIER

ABOGADOS

WEB SITE: www.cavelier-abogados.com
E-MAIL: cavelier@colomsat.net.co

EDIFICIO SISKI
CARRERA 4 No. 72 - 35
BOGOTA 8, COLOMBIA

76
TELEFONO: (57) (1) 347-3611
TELEFAX: (57) (1) 217-9211 (57) (1) 310-4995

Señor Jefe de la
DIVISION DE NUEVAS CREACIONES
Superintendencia de Industria y Comercio
E. S. D.

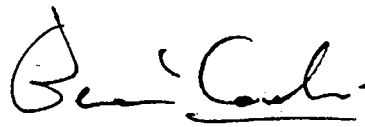
Poderdante: ROHM AND HAAS COMPANY

Poder conferido el: 09-04-87

Yo, GERMAN CAVELIER, obrando en mi calidad de apoderado principal del poderdante arriba mencionado, atentamente manifiesto a Usted que sustituyo el poder que me ha sido conferido en la persona del doctor EMILIO FERRERO, Abogado con Tarjeta Profesional No. 31.929, con todas las facultades que me fueron conferidas.

Hago la anterior sustitución conforme al artículo 66 del Código de Procedimiento Civil ya que los otros sustitutos faltan en este momento.

Señor Jefe,


GERMAN CAVELIER

T.P.A. No. 832

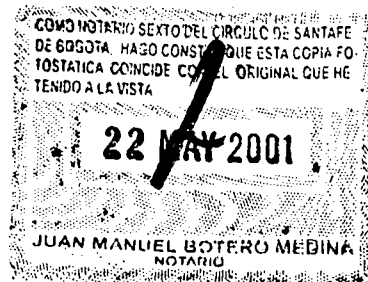
C.C. No. 2.877.924 de Bogotá

Acepto:


EMILIO FERRERO

T.P.A. N° 31.929

C.C. No. 438.019 de Usaquén



NOTARIA SEXTA DE BOGOTA
RECONOCIMIENTO Y PRESENTACION PERSONAL

Santafé de Bogotá D. C.

Ante Mí JUAN MANUEL BOTERO MEDINA

NOTARIO SEXTO DEL CIRCULO DE BOGOTA

Compareció(eron) personalmente,

22 FEB. 1989

quien(es) exhibió(eron) la(s) C. C.

2877928

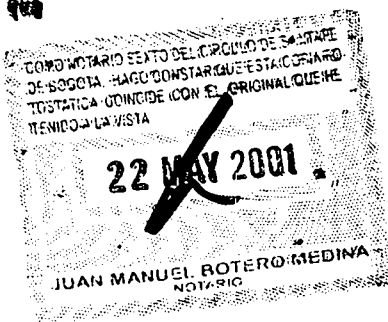
438019

y la(s) Libreta(s) Militar(es):

832

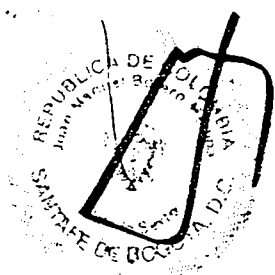
31929

declarado(s) en Bogotá, y declaró(aron) que la(s) firma(s) que
aparece(n) en el presente documento es(son) la(s) suya(s) y que
el contenido del mismo es cierto
y que se hizo esta diligencia.



[Handwritten signature]

[Handwritten signature]



Folios 77 y 78
tarjetas
Se extrae folio 79
correspondiente a
extraído
angelina

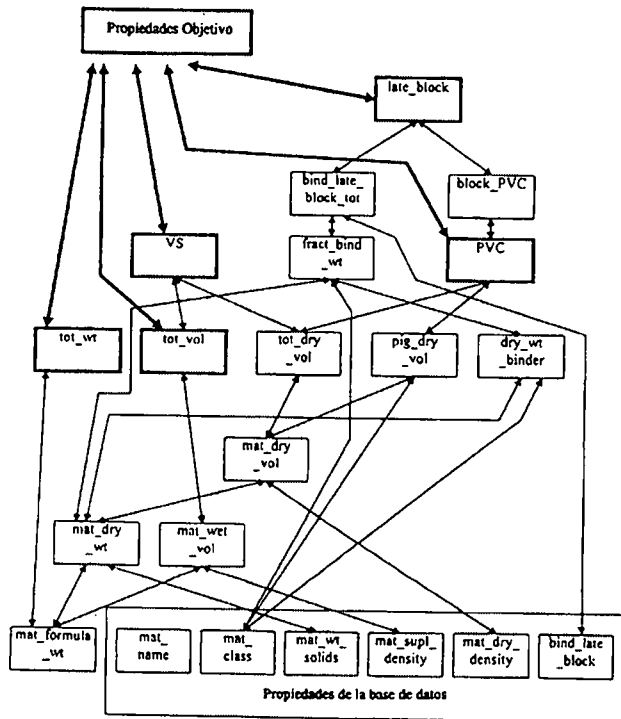
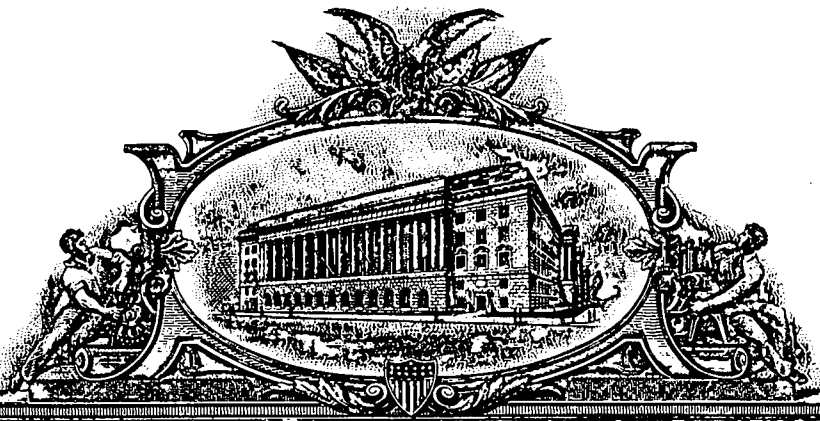


Fig. 1

PA 359055

**THE UNITED STATES OF AMERICA****TO ALL TO WHOM THESE PRESENTS SHALL COME:****UNITED STATES DEPARTMENT OF COMMERCE****United States Patent and Trademark Office****February 01, 2001**

**THIS IS TO CERTIFY THAT ANNEXED HERETO IS A TRUE COPY FROM
THE RECORDS OF THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK
OFFICE OF THOSE PAPERS OF THE BELOW IDENTIFIED PATENT
APPLICATION THAT MET THE REQUIREMENTS TO BE GRANTED A
FILING DATE UNDER 35 USC 111.**

APPLICATION NUMBER: 60/206,619

FILING DATE: May 24, 2000



**By Authority of the
COMMISSIONER OF PATENTS AND TRADEMARKS**

**P. R. GRANT
Certifying Officer**

A/prev

05-25-00

05/24/00
JCE30 U.S. PTO

Please type a plus sign (+) inside this box → ☐

Approved for use through 01/31/2001. OMB 0651-0037
Patent and Trademark Office; U.S. DEPARTMENT OF COMMERCE
Under the Paperwork Reduction Act of 1995, no persons are required to respond to a collection of information unless it displays a valid OMB control number.

+

10682 U.S. PTO
60/206619
05/24/00

PROVISIONAL APPLICATION FOR PATENT COVER SHEET
This is a request for filing a PROVISIONAL APPLICATION FOR PATENT under 37 CFR 1.53 (c).

INVENTOR(S)					
Given Name (first and middle [if any])		Family Name or Surname		Residence (City and either State or Foreign Country)	
DR. JOHN W. DR. DANIEL		HOOK, III PIETRI		Warminster, PA 18974 83600 Les Adrets de l'Esterel, FRANCE	
☐ Additional inventors are being named on the ___ separately numbered sheets attached hereto					
TITLE OF THE INVENTION (280 characters max)					
COMPUTER BASED PRODUCT FORMULATION					
Direct all correspondence to: CORRESPONDENCE ADDRESS					
☐ Customer Number				Place Customer Number Bar Code Label here	
OR		Type Customer Number here			
☒ Firm or Individual Name		Clifford Chance Rogers & Wells			
Address		Attn: James V. Mahon			
Address		200 Park Avenue			
City		New York		State	NY
Country		USA		ZIP	10166-0153
		Telephone	212-878-8073	Fax	212-878-8375
ENCLOSED APPLICATION PARTS (check all that apply)					
☒ Specification Number of Pages		27		☐ Small Entity Statement	
☒ Drawing(s) Number of Sheets		2		☐ Other (specify)	
METHOD OF PAYMENT OF FILING FEES FOR THIS PROVISIONAL APPLICATION FOR PATENT (check one)					
☐ A check or money order is enclosed to cover the filing fees				FILING FEE AMOUNT (\$)	
☒ The Commissioner is hereby authorized to charge filing fees or credit any overpayment to Deposit Account Number: 50-0521				150.00	
The invention was made by an agency of the United States Government or under a contract with an agency of the United States Government.					
☒ No.					
☐ Yes, the name of the U.S. Government agency and the Government contract number are: _____					

Respectfully submitted,

SIGNATURE James V. Mahon
TYPED or PRINTED NAME JAMES V. MAHON
TELEPHONE 212-878-8073

Date 5 / 24 / 00

REGISTRATION NO. 41,966
(if appropriate)
Docket Number: 6258-5

USE ONLY FOR FILING A PROVISIONAL APPLICATION FOR PATENT

This collection of information is required by 37 CFR 1.51. The information is used by the public to file (and by the PTO to process) a provisional application. Confidentiality is governed by 35 U.S.C. 122 and 37 CFR 1.14. This collection is estimated to take 8 hours to complete, including gathering, preparing, and submitting the complete provisional application to the PTO. Time will vary depending upon the individual case. Any comments on the amount of time you require to complete this form and/or suggestions for reducing this burden, should be sent to the Chief Information Officer, U.S. Patent and Trademark Office, U.S. Department of Commerce, Washington, D.C., 20231. DO NOT SEND FEES OR COMPLETED FORMS TO THIS ADDRESS. SEND TO: Box Provisional Application, Assistant Commissioner for Patents, Washington, D.C., 20231

83

I hereby certify under 37 CFR 1.10 that this correspondence is being deposited with the United States Postal Service as "Express Mail Post Office to Addressee" with sufficient postage on the date indicated above and is addressed to the Assistant Commissioner for Patents, Washington, D.C. 20231.

Name _____

SECRET

DR. DANIEL PIETRI.

NYB 1094021.2

Attorney Docket 006258/00005

COMPUTER-BASED PRODUCT FORMULATION

The details of one or more embodiments of the invention are set forth in the accompanying drawings and the description below. Other features, objects, and advantages of the invention will be apparent from the description and drawings, and from the claims.

DESCRIPTION OF THE FIGURES

Figs. 1 and 2 are formulation knowledge representation.

DETAILED DESCRIPTION OF THE INVENTION

A formulation engine can help to formulate a new chemical composition (a "target composition"). This is done through the processing of static knowledge (SK) and the determination and processing of dynamic knowledge (DK). In general, static knowledge encompasses the known, pre-determined, or use-specified values that are received by the formulation engine, while dynamic knowledge encompasses values determined, and inferences drawn, through processing by the formulation engine. Thus, dynamic knowledge is an explicit or implicit function of static knowledge and/or of other types of dynamic knowledge. Static knowledge can include, e.g., data about the intrinsic properties of various chemical compositions (e.g., mass, volume), manufacturing facilities (e.g., capacity), and manufacturing processes (e.g., temperature). Static knowledge may be represented in a database or received through user inputs. Dynamic knowledge includes similar types of information which may be undetermined prior to computation by the formulation engine. Dynamic knowledge can also include intermediate properties required for a computation. For example, if a specific processing temperature is specified by the user, then that temperature may be considered static knowledge. However, if the user indicates a range of possible values which constrains that processing temperature, then temperature is part of the dynamic knowledge, values of which may vary within the specified range during a computation. Classification of a particular variable as SK or DK is determined by the context of not only the knowledge domain, but also the specific user request.

The formulation engine can help to determine a formulation of a target composition. This determination is based on desired properties ("output constraints") of that target composition and based on specified properties of the constituent ingredients and the

manufacturing processes used to produce the target composition ("input constraints"). The formulation engine can process the input constraints, static knowledge, and dynamic knowledge to determine a target formulation composition satisfying the output constraints. For example, in a paint formulation implementation, discussed below, the formulation engine can select from among a set of specified constituent ingredients, and determine amounts for those ingredients, to produce a paint having a block resistance property within a particular range.

The formulation engine determines a target composition using pre-determined and/or dynamically determined associations between static and dynamic knowledge. These associations between SK and DK are referred to as a formulation knowledge web (FKW). In general, processing using this formulation knowledge web involves (1) building the formulation knowledge web (FKW) between SK and DK, and then (2) using the formulation knowledge web (FKW) to solve a formulation problem. Building the formulation knowledge web may include both manual processes (i.e., programming steps by a programmer) and automated steps. In the example described herein, the manually determined relations are specified in the PROLOG IV language, and the automated determination and building of relations can be accomplished using inference-determining functions of the PROGLOG IV programming language.

The relationships between the SK and DK may be represented in a directional or a non-directional manner for processing by the formulation engine. If we have a dynamic knowledge set **DK** of N variables, (DK_n for $n = 1$ to N), and a static knowledge set **SK** of M variable (SK_m for $m = 1$ to M), then the FKW can be represented as a series of functions:

$$DK_n = f(SK_m)$$

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

To fully calculate formulation recommendations, the formulation engine also may use the inverse functions:

$$SK_m = f'(DK_n)$$

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

In a non-directional representation, such as the Prolog IV example below, these inverse functions are implied explicitly by the direct functions. In a less sophisticated

representation, such as one might do in another language, these inverse functions could be built by the programmer or by the formulation engine.

The formulation knowledge web used in a particular implementation will differ depending on the particular implementation. For example, an implementation directed to formulating paint will have a different formulation knowledge web than an implementation directed to producing agricultural chemicals. In the discussion that follows, a generally applicable principal for building a formulation knowledge web is discussed, followed by implementation-specific examples. This general principle can be directly applied to, or adapted for, a variety of different problem domains.

The general principle of building a formulation knowledge web involves allocating variables to represent static and dynamic knowledge, and establishing relations between those variables. For example, a variable SK_i can be created for each item of static knowledge. Similarly, a variable DK_i can be created for each item of dynamic knowledge. The variables SK_i and DK_i may be allocated by a programmer using a PROLOG IV declaration, or the variables may be dynamically determined based on inferences drawn during PROLOG IV processing. Each variable (DK_i) may have associated constraints that define a domain of valid settings of that variable. For example, the variable DK_i may be constrained to have values between 1 and 10. Relations between variables also may be defined by a set of constraints (e.g. numerical, Boolean).

Once the FKW has been constructed, the Formulation Engine can use the FKW to process the specific user request such as DK calculation (concluding all possible values for DK_n) or DK optimization (concluding which value of DK_m is needed to optimize DK_n).

A simple example of relations between variables and the use of constraints is illustrated by a calculation of Formulation Total Weight (TW). Formulation total weight is the weight of a target composition and can be determined as a sum of the weights of the individual materials in the target composition. Thus, for a target composition composed of a set of n materials, TW can be calculated as follows:

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

As a simple example, assume that TW can be formed from two individual materials MW₁ and MW₂, and that the user has specified the following constraints: $1000 \leq TW \leq 1050$; MW₁ = 800; and $100 \leq MW_2 \leq 300$. The formulation engine processes this information and determine a formulation of MW₁ and MW₂ satisfying their constraints and the constraints on TW. In this case, the formulation engine recognizes that, based on the input constraints, MW₁ must have the fixed value of 800, and, to satisfy constraints on MW₂ and TW, MW₂ can have a value between 200 and 250. Combining MW₁ and MW₂ according to these results will produce a target composition with a weight of between 1000 and 1050.

A formulation engine can determine chemical product formulation information using a database storing knowledge about characteristics of, and interrelationships between, various raw materials, product applications, manufacturing processes, and chemical product formulations. These characteristics and interrelationships may be implemented by interconnecting different variables in a knowledge "web." This "web" is referred to herein as a formulation knowledge web.

The foregoing example illustrates the use of a formulation knowledge web for selection of material quantity. Implementations may also use a formulation knowledge web to select from among different materials or process options. For example, two different materials X and Y, each with its own constraints and properties, may satisfy a constraint associated with a target composition. A formulation knowledge web may be used to determine which of X and Y will, in fact, satisfy constraints of the target composition. Thus, a formulation knowledge web can represent knowledge about material selection, as well as quantitative calculation (e.g. material quantity, property value).

Treating both material (or process) selection and quantitative calculation at the same level of the algorithm is useful in building the FKW so that the formulation engine can simultaneously consider both the selection and the quantity needed in the user request. This can be done, for example, by expressing the material or process choice in numerical terms such as its rank (r_i) in the list of allowed choices. The selection then becomes a numerical function of dynamic knowledge (DK) and the FKW then is fully numeric.

Problem Solving

Determining formulation properties using the formulation engine can include calculating a resulting set of domains (i.e., intervals) for each of a set of factors (expressed as variable) influencing the formulation property. These domains may be associated with variables in an interface variable group (IVG). Example IVG variables can include material names, material quantities, formulation property values, and formulation and manufacturing process values.

In some implementations, calculating intervals can be performed by enumerating all values of variables, and then calculating results for each enumeration (i.e., the result may be determined using all permutations of permitted variable values). For example, if X and Y are integer variables used to calculate Z, and $1 \leq X \leq 2$, and $1 \leq Y \leq 3$, then calculating the interval of Z requires calculating Z for six different (X,Y) combinations (1,1), (1,2), (1,3), (2,1), (2,2), and (2,3).

A more complex challenge is presented by solving the total weight example above. While enumeration of the entire range would be possible, it is better to initially use a numeric solver which takes advantage of interval arithmetic and fixed point algorithm. In such a case, a numerical solver could make the following deductions:

- MW_1 is fixed at 800 by the initial constraint.
- MW_2 is in the range [100, 300] inclusive by the initial constraint.
- From the addition definition of TW, TW is bounded by the minimum value of 900 and the upper bound of 1100 ,
- From the initial constraint on TW we know TW is bounded by 1000 and 1050.
- Based on the two TW bounds in the previous two bullets, the largest minimum bound on TW is 1000, the smallest maximum bound is 1050,.
- MW_2 is bound by the TW definition, the fact that MW_1 is fixed at 800, the previous conclusion that TW is in the range [1000, 1050] inclusive. So MW_2 is bounded by the [200, 250] inclusive.
- No further reductions of the variable ranges are possible so the solver stops.

In this example the solver has correctly concluded the range on MW_2 . However, in the general case, numerical solvers may not be able to conclude the actual minimum ranges, so the solver may be combined with an enumeration algorithm which explores the reduced

constraint set from the solver. This may be accomplished using a classical interval partitioning algorithm. This combination of range calculation and numeric enumeration then achieves the final reduction of the ranges more efficiently than enumeration alone, since it does not have to search the entire initial constraint space, and more reliably than interval arithmetic alone.

- 5 Again, it is clear that treating material or process selections as numeric variables DK_i in the FKW places the selection of a specific material or process element at the same level as the numeric constraints.

Modern programming languages supporting constraint logic programming and interval arithmetic, such as the Prolog IV language, can automate such interval calculations. In the
10 disclosure that follows, a Prolog IV-based formulation engine is described herein. Implementations may use other programming languages.

Dynamic Knowledge (DK) optimization

The formulation engine can perform dynamic knowledge optimization to find a value of a numerical variable (V_i) that optimizes a particular formulation characteristic. An optimum
15 value of a variable V_i is affected by the variable's direct and indirect relationships to other variables (this corresponds to direct and indirect relationships between DK elements). Implementations can use one or more optimization algorithms to find an optimum value for a variable. In general, an optimization algorithm that can provide a true optimal value is desirable (preferably, the selected algorithm should provide true optimization even in the
20 presence of local optimums). The formulation engine can provide for optimization of a variable and can identify a current domain of the other variables needed to obtain this optimization.

The Branch and Bound Algorithm is a well known example of such an optimization algorithm which can find a true optimal value even in the presence of local optimums. The
25 enumeration algorithm defines a search tree and uses the Branch and Bound strategy to find the optimum for this iteration. That optimum (O_n) becomes a boundary for the next iteration, so the algorithm adds a new constraint stating that $O_{n+1} > O_n$. The iteration continues until the tree is completed.

Paint Formulation Implementation:

The operation of a formulation engine adapted for formulating paint products will now be detailed. In this example, the formulation engine is used to select a paint binder that can give good late block resistance to a paint while maintaining volume (V), volume solids (VS) and pigment volume content (PVC) within desired target ranges. The paint product formulation engine determines the paint binder using a database of raw material characteristics (each of which may be expressed by a different field in a database record), and a formulation knowledge web expressing knowledge of the different factors that affect the late block resistance.

Fig. 1 shows an example formulation knowledge web that captures paint formulation knowledge. Program source code and database values for an implementation of this formulation knowledge web are shown in Table 1.

Table 1: Prolog IV Program Code

```

/* Database of Materials */

15 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]).
20 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
25 200','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 */

30
/* Relationships */

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

35
mat_class(V):-
   material(_,_,V,_).

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

40
mat_supplied_density(V,[_,V,_,_]).

```

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

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

5

/* Builds Quantity Relations for each material */

build_material_quantity({}).

build_material_quantity([[D,[Formula_Wt,Wet_Vol,Dry_Wt,Dry_Vol
10 |Q]]|Data_Quant_List]) :-

% Gets data

mat_supplied_density(D,Supp_Dens),

mat_dry_density(D,Dry_Dens),

mat_wt_solids(D,Wt_Sol),

15 % 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).

20

/* Builds Total Weight Relation */

tot_wt([],0).

25 tot_wt([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-

mat_formula_wt([D,Q],FW),

V = FW.+V1,

tot_wt(Data_Quant_List,V1).

30

/* Builds Total Volume Relation */

tot_vol([],0).

tot_vol([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-

35 mat_wet_vol([D,Q],WV),

V = WV.+V1,

tot_vol(Data_Quant_List,V1).

40

/* Builds Total Dry Volume Relation */

tot_dry_vol([],0).

tot_dry_vol([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-

mat_dry_vol([D,Q],DV),

45 V = DV.+V1,

tot_dry_vol(Data_Quant_List,V1).

50

/* Builds Pigment Dry Volume Relation */

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

```
5  /* Builds Total Dry Weight Relation */
```

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

```
/* Builds Dry Weight Binder Relation */
```

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

```
20 /* 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) :-
25  Fract_Bind_Wt = Dry_Wt./.DWB,
    build_fract_bind_wt_quantity(Binder_Data_Quant_List,DWB).
```

```
/* Builds Volume Solids Relation */
```

```
30 vs(Formulation_Data_Quant_List,V) :-
    tot_dry_vol(Formulation_Data_Quant_List,TDV),
    tot_vol(Formulation_Data_Quant_List,TV),
    V = TDVA./.TV.
35
```

```
/* Builds Pigment Volume Content Relation */
```

```
40 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.
```

```
45 /* Builds block PVC Relation */
```

```
block_pvc(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,
V) :-
```

```
50 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)).

```

5  /* 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),
10    fract_bind_wt([D,Q],FBW),
    V=(LB.*.FBW).+.V1,
    bind_late_block_tot(Binder_Data_Quant_List,V1).

15 /* 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),
20    block_PVC(Pigment_Data_Quant_List,Formulation_Data_Quant_List,
    BPVC),
    V = BLBT.+.BPVC.*(10.-.BLBT).

```

25 The formulation engine can access a database of raw materials to determine inherent characteristics of the raw materials as well as uses for those materials. For example, the program code of Table 1 includes a database of twelve raw materials. This database includes the name, classification, solid fraction, supplied density, dry density and late block resistance characteristics of each material. The following table, more fully explained below, shows the

30 content of this example material database:

Table 2

Mat_name	Mat_Class.	mat_wt_solids	mat_suppli ed_density	mat_dry _density	bind_la te_bloc k
Water	Water	0	1	1	
Propylene Glycol	Solvent	0	1.036	1.039	
Skane M-8	Biocide	0.45	1.032	1.0345	
Tamol 731	Dispersant	0.25	1.104	1.605	
Triton CF-10	Surfactant	1	1.05	1.05	
Ti-Pure R-700	TiO2	1	4	4	

Mat_name	Mat_Class.	mat_wt_solids	mat_supplied_density	mat_dry_density	bind_late_block
ASP-170	Extender	1	2.58	2.58	
Rhoplex HG-74D	Binder	0.42	1.032	1.0715	7
Rhoplex HG-95P	Binder	0.465	1.0608	1.1429	9
Rhoplex Multilobe 200	Binder	0.535	1.0648	1.1215	2
Texanol	Coalescent	0	0.95	0.95	
Acrysol RM-2020	Thickener	0.2	1.0426	1.2569	

The Table 1 source code also includes a set of six functions to access information from the materials database. These functions are shown in pseudo-code form and further explained as follows:

5 Functions to Access Materials Database:

mat_name(i): Accesses a unique name associated with a material.

mat_class(i): Accesses classification information about the material. The classification information may identify uses of the material. In Table 1, material classifications include "Water", "Solvent" Binder", etc.

10 mat_wt_solids(i): Returns the weight fraction of material (i) which is solid

mat_supplied_density(i): Returns the density (kg/li) of a material in it's supplied form (liquid or solid)

mat_dry_density(i): Returns the density (kg/liter) of the dry solids of the material in a paint film.

15 bind_late_block(i): Returns the late block resistance of an 18 PVC gloss paint formulation based on binder (i)

In this example, a basic unit of each material is weight. For a particular formulation of materials, the total material formulation is the material formulation weight expressed as:

mat_formula_wt(i) is the weight of the material (i) in the formulation.

20 The formulation engine processes a formulation knowledge web that interrelates the materials as well as knowledge about target product formulation and manufacturing

processes. In the example herein, the formulation knowledge web includes a representation of the following formulation knowledge:

The dry weight of a specific material is:

$$\text{mat_dry_wt}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) * \text{mat_wt_solids}(i)$$

- 5 The volume contribution of a specific material(i) in the wet paint is:

$$\text{mat_wet_vol}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) / \text{mat_supplied_density}(i)$$

The volume contribution of a specific material (i) in the dry paint is:

$$\text{mat_dry_vol}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{mat_dry_density}(i)$$

The total weight of the paint is the sum of the individual material weights:

10
$$\text{tot_wt} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_formula_wt}(i)$$

The total volume of the paint is the sum of the individual material wet volumes:

$$\text{tot_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_wet_vol}(i)$$

The total dry volume of the paint is the sum of the individual dry volumes:

$$\text{tot_dry_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

- 15 The dry volume of pigment in the paint is a similar sum, applied only to the pigments:

$$\text{pig_dry_vol} = \sum_{\text{pigments}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

The dry weight of the binder in the paint is:

$$\text{dry_wt_binder} = \sum_{\text{all binders}} \text{mat_dry_wt}(i)$$

The binder fraction of a specific binder (i) is:

20
$$\text{fract_bind_wt}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{dry_wt_binder}$$

The Volume Solids of the formulation (VS) is:

$$\text{VS} = \text{tot_dry_vol} / \text{tot_vol}$$

The Pigment Volume Content of the formulation (PVC) is:

$$\text{PVC} = \text{pig_dry_vol} / \text{tot_dry_vol}$$

- 25 In some cases, a material's effect on the characteristics of a formulation may be represented by a series of different formulas, the particular formula to be applied depending on the concentration of the material in the formulation. For example, the association between PVC and block resistance can depend on the concentration of PVC and may be expressed by the following set of relationships:

tot_PVC_add	block_PVC
--------------------	------------------

PVC < 30%	0
30% ≤ PVC ≤ 40%	(tot_PVC - 0.3) * 10
PVC > 40%	1

The binder contribution to block resistance is:

bind_late_block_tot = $\sum_{i=\text{binders}} (\text{bind_late_block}(i) * \text{fract_bind_wt}(i))$

The target property, Late Block, is:

5 late_block = bind_late_block_tot + block_PVC * (10 - bind_late_block_tot).

The formulation engine may determine formula characteristics, and may help to determine a modified formulation based on a product formulation script. The product formulation script can outline a recipe (i.e., a list of materials or ingredients) that can be used to formulate a product, constraints on particular ingredients in the recipe, options for selection from among materials, and constraints on the output product that is produced. An example list of ingredients can include the following ingredients in a basic paint formulation recipe:

Table 3: Starting Point Formulation

Material	Weight
Water	5.00
Propylene Glycol	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
Water	20.00
Rhoplex HG-74D	529.00
Texanol	30.00
Acrysol RM-2020	40.00
Water	121.00

The expected properties of this starting point formulation can be calculated by the formulation engine using the formulation knowledge web of Fig. 1 (as expressed by the program code of Table 1). These starting point properties are as follows:

Property	Value
Total Weight (kg)	1003.00
Total Volume (l)	833.95
Volume Solids (%)	32.79
PVC (%)	18.28
Late Block (0 to 10)	7.00

5 A user may wish to determine a new paint formulation by modifying the starting point formulation based on a set of user-specified constraints. The product formulation script can identify user-specified constraints such as these material choice and material level constraints.

A material choice constraint specify groups of materials that are, to some degree, interchangeable. However, specific choices within a group may have different properties. The
10 formulation engine can determine the specific members of a group that should be selected to satisfy user-specified formulation constraints. Material classification information in the raw materials database can be used to determine suitable materials for inclusion within a group. As an example, the database of Table 2 identifies three different binders. In modifying the starting point formulation of Table 3, a user can specify that the binder ("Rhoplex HG-74D" in Table
15 3) may be altered by the formulation engine and may be one of the three binders(i) Rhoplex HG-74D, (ii) Rhoplex HG-95P or (iii) Rhoplex Multilobe 200. The user may also specify material level constraints; (e.g., "the weight of the binder is to be between 400 and 600 kg inclusive). For our example, the following additional constraints are specified:

Water Level Constraint:

20 Let the weight of the last water in the formulation be between 0 and 300 kg inclusive.

Other Materials:

Let all other material choices and levels in the starting point be fixed to their initial values given in the formulation of Table 3.

98

In addition to specifying constraints on the input materials, the user can specify target constraints for the formulated (output) product. In our example, these constraints are as follows:

Let the Total Weight be any value (unconstrained);

5 Let the Total Volume be between 833 and 835 inclusive;

Let the Volume Solids be between 32.5% and 33.0% inclusive;

Let the PVC be less than or equal to 18.5%; and

Let the Late Block be greater than or equal to 7.0.

10 From our starting point formulation constraints, the formulation system, using the program knowledge in Table 1, can conclude that the following two solution spaces satisfy the user-specified input and target product constraints:

Solution #1:

Solution #1 is a formulation in which the formulation engine has selected Rhoplex HG-74D as the binder. The resultant formulation "space" is as follows:

Material	Min Weight	Max Weight
Water	5.00	5.00
Propylene Glycol	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
Water	20.00	20.00
<i>Rhoplex HG-74D</i>	<i>522.04</i>	<i>534.35</i>
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
Water	<i>114.86</i>	<i>128.79</i>

15 The specific properties of a paint produced according to solution #1 will depend on the specific material levels selected and will have the following ranges:

Property	Min Value	Max Value
Total Weight (kg)	989.90	1016.14
Total Volume (l)	833.00	835.00
Volume Solids (%)	32.50	33.00
PVC (%)	18.15	18.47
Late Block (0 to 10)	7.00	7.00

Solution 2

Solution #2 is a formulation in which the formulation engine has selected Rhoplex HG-95P as the binder. The resultant formulation space is as follows:

Material	Min Weight	Max Weight
Water	5.00	5.00
Propylene Glycol	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
Water	20.00	20.00
<i>Rhoplex HG-95P</i>	<i>502.94</i>	<i>514.80</i>
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
Water	<i>147.35</i>	<i>160.53</i>

The specific properties of a paint produced according to solution #2 will depend on the specific material levels selected and will have the following ranges:

Property	Min Value	Max Value
Total Weight (kg)	1003.29	1028.33
Total Volume (l)	833.00	835.00
Volume Solids (%)	32.50	33.00
PVC (%)	18.15	18.47
Late Block (0 to 10)	9.00	9.00

100

Rejected Choices

The formulation engine also determines that binder Rhoplex Multilobe 200 cannot satisfy the specified constraint. Therefore, the formulation engine rejects Rhoplex Multilobe 200 as a binder. In the case of Rhoplex Multilobe 200, the formulation knowledge web can
5 determine that, for the specified constraints:

bind_late_block = 2

fract_bind_wt = 1

block_PVC = 0

This results in the conclusion that bind_late_block_tot = 2 and that late_block = 2. This is not
10 a valid result due to the specified constraint requiring the late_block to be at least 7.

Consequently, Rhoplex Multilobe 200 is rejected by the formulation engine.

As seen from the above-example, using the user-specified constraints, formulations meeting those constraints can be determined. However, characteristics of the determined formulation solutions may not span the entire space permitted by a constraint. For example,
15 although the initial constraints indicated that between 400 and 600 kg of binder may be included, if this range was, in fact, used in the solution formulations, other constraints may be violated. To provide further formulation guidance, the formulation engine can provide revised input level constraints to ensure that a formulation solution does, in fact, meet desired constraints. In this example, the formulation engine can make the following determinations:

- 20 • The Binder should be either Rhoplex HG-74D or Rhoplex HG-95P.
- The binder weight should be between 522.04 and 534.16 kg when using Rhoplex HG-74D and 502.94 to 514.61 kg when using Rhoplex HG-95P
- The water weight should be between 116.01 and 127.48 when using Rhoplex HG-74D and 148.50 and 159.26 when using Rhoplex HG-95P.
- 25 • The Total Weight will be between 1001.49 and 1016.22
- The Volume will be between 833 and 835 (same as input constraint)
- The Volume Solids will be 32.50 and 32.97
- The PVC will be between 18.21% and 18.46% (tighter than input)
- The Late Block Resistance will be between 7 and 9 (tighter than input)

101

If a user subsequently constrains the Late Block Resistance further to be above 8, the formulation engine will conclude that the correct binder will be Rhoplex HG-95P and characteristics of the resultant product will have the numeric constraints expressed above. Thus, the formulation engine can be used to determine appropriate materials and material levels to meet both input and target property constraints. Depending on the complexity of problems to be solved, implementations may use larger numbers of paint performance properties and raw materials and levels.

The following code show essential details of PROLOG IV product formulation script that specifies the basic paint formulation recipe of Table 3, as well as permitted constraints and options for formulating a paint using that basic recipe.

```
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',_],  
],[]).
```

5

Implementations may include a graphical user interface front-end to generate the preceding input and query code.

Millbase Implementation:

10 In addition to selection and determination of materials and material levels, a formulation engine can be used to determine the manufacturing, application, and formulation processes to be used for a particular material. In the example that follows, an implementation of the formulation engine is used to determine characteristics of a millbase for use in herbicide preparation.

15 In the preparation of herbicides for use in agricultural applications one of the process steps is the preparation of a millbase. A key property of the final millbase is the particle size distribution, which largely determines other key properties of the final formulation such as viscosity profile, stability, and suspensibility. This distribution can be represented by the 50th percentile size and the 90th percentile size. The 50th percentile size is the size for which 50% of the particles are smaller. The 90th percentile size is the size for which 90% of the particles
20 are smaller) (these sizes are represented by the variables ps_50_final and ps_90_final, respectively).

The final particle size of a millbase can be predicted from the power draw of the specific mill used, the density of the beads in the mill, the process method in which the mill is used, the milling time, the initial particle size distribution, and a number of other equipment,
25 process, and material properties. A set of variables and equations representing this type of knowledge is expressed for a single active ingredient millbase below:

Equipment Database

An equipment database identifies mill equipment and associated properties. The equipment database may include the following data fields:

30 mill_type: unique name of the mill used to grind the millbase
milling_power_draw: maximum power drawn by this mill_type
bead_type: unique name of the type of beads used

bead_density: density of the beads used

For this example, the equipment database is populated as follows:

mill_type	mill_power_draw (Watts)
Dynomill KD-15 (15 L)	11,250
Dynomill KD-50 (49 L)	18,750
Netzsch LMC 20 (20 L)	7,500
Netzsch LMC 60 (50 L)	18,750

bead_type	bead_density (g/ml)
Sand	2.5
Glass - unleaded	2.5
Flint Pebble	2.6
Glass - leaded	3.6
Zircon Oxide (YTZ)	6.0
Tungsten Carbide	15.0

5 Process Database

A process database identifies particular milling processes and characteristics of those processes. The process database may include the following data fields:

mill_operation_type: Unique name identifying a particular method of running a mill.

d90_to_d50_ratio: Expected ratio of the 90th percentile size to the 50th percentile size
for a particular method of running the mill.

For this example, the process database may be populated as follows:

mill_operation_type	d90_to_d50_ratio
Continuous Recirculation	4.00
One Discrete Pass	3.75
Two Discrete Passes	3.50
Three Discrete Passes	3.25

10x

Four or More Discrete Passes	3.00
------------------------------	------

Material Database

A Material database includes characteristics of raw materials. The materials database may include the following data fields:

5

mat_name: unique name of the material in the formulation

mat_wt_solids : weight fraction of solids of the material

mat_dry_density: density of the material in the dry formulation

mat_supplied_density: density of the material in its supplied form

tech_surface_energy: surface energy of the technical active material in the millbase

ps_50_initial: particle size of the technical active material in the millbase

For this example, the materials database is populated as follows:

mat_name	mat_wt_solids	mat_dry_density (g/ml)	mat_supplied_density (g/ml)	tech_surface_energy (J/m ²)	ps_50_initial (microns)
Goal Tech	100%	1.45	1.45	0.04	15
Kelzan	100%	1.50	1.50		
Proxel GXL	25.3%	1.00	1.13		
Water	0%	1.00	1.00		

Properties of a prepared millbase may be determined, in part, based on a set of initial properties associated with various manufacturing-related variables. These variables may include the following:

material_name	mat_formula_wt	mill_type	bead_type
bead_size	mill_operation_type	milling_time	bead_fill_fraction

105

These variables can be used to calculate a set of intermediate properties of the millbase. The intermediate properties, and the calculations to obtain these properties, can include the following:

```

mat_dry_wt(i) = mat_formula_wt(i) * mat_wt_solids(i)
5 mat_dry_vol(i) = mat_dry_wt(i) / mat_dry_density(i)
mat_wet_vol(i) = mat_formula_wt(i) / mat_supplied_density(i)
tot_dry_vol_millbase =  $\sum_{\text{all materials in millbase}}$  mat_dry_vol(i)
tot_vol_millbase =  $\sum_{\text{all materials in millbase}}$  mat_wet_vol(i)
tot_wt_millbase =  $\sum_{\text{all materials in millbase}}$  mat_formula_wt(i)
10 solids_factor_millbase = tot_dry_vol_millbase / tot_vol_millbase
bead_density_factor = bead_density/2.5
milling_energy = milling_power_draw * milling_time
specific_milling_energy = milling_energy / tot_wt_millbase
milling_efficiency = solids_factor_millbase * bead_density_factor * bead_fill_fraction
15 * bead_size
area_to_diameter_factor_millbase = 0.006 * solids_factor_millbase / tot_wt_millbase
surface_area_increase = (milling_efficiency * specific_milling_energy) /
tech_surface_energy
surface_area_50_0_millbase = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase /
20 ps_50_initial
surface_area_50_final_millbase = surface_area_50_0_millbase + surface_area_increase

```

Final particle sizes can be calculated from the intermediate properties as follows:

```

ps_50_final = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase /
surface_area_50_final_millbase
25 ps_90_final = ps_50_final * d90_to_d50_ratio

```

These relationships are shown in Fig. 2. Program code implementing this example follows from the teachings of the program code of Table 1. In this example, knowledge about material, process and equipment characteristics are interrelated. Material choice and level are represented by material_name and mat_formula_wt. Process choice and parameters are given
30 by mill_operation_type and choices of milling time and bead_fill_fraction. Equipment

choices and parameter are given by the mill_type and bead_type choices and the bead_size parameter.

Use of the above-described formulation knowledge web and databases will now be described. In the example that follows, a formulation knowledge web is used to determine processes and equipment that can result in desired target particle sizes for ps_50_final and PS_90_final.

Use of the millbase formulation knowledge web may begin with user-selection of a set of initial constraints. For this example, the user-selected constraints include the following material, target millbase, equipment choice, equipment parameter, process choice, and process parameter constraints:

User-Specified Material Constraints:

material_name	mat_formula_wt min (kg)	mat_formula_wt max (kg)
Goal Tech	49.95	49.95
Kelzan	0.05	00.05
Proxel GXL	0.05	00.05
Water	49.95	49.95

User-Specified Target Millbase Constraints:

Property	minimum (microns)	maximum (microns)
ps_50_final	0.9	1.1
ps_90_final		3.5

User-Specified Equipment Choice Constraints:

Equipment Type	Allowed Choices
mill_type	Dynomill KD-15 (15 L)
bead_type	Glass - unleaded Glass - leaded Zircon Oxide (YTZ)

107

User-Specified Equipment Parameter Constraint:

Property	minimum (mm)	maximum (mm)
bead_size	1	1

User-Specified Process Choice Constraints

Process Type	Allowed Choices
mill_operation_type	Continuous Recirculation One Discrete Pass Two Discrete Passes Three Discrete Passes Four or More Discrete Passes

User-Specified Process Parameter Constraints:

Property	minimum	maximum
milling_time (minutes)	30	90
bead_fill_fraction	0.8	0.8

Given these constraints, the databases and the relationships the formulation engine can dynamically determine the processes needed to achieve the target particle sizes. Based on the described formulas and constraints, the formulation engine may reach the following conclusion with respect to mill operation type and operation time:

mill_operation_type conclusion:

mill_operation_type	result
Continuous Recirculation	(No Solution)
One Discrete Pass	(No Solution)
Two Discrete Passes	Can Meet Constraints
Three Discrete Passes	Can Meet Constraints
Four or More Discrete Passes	Can Meet Constraints

milling_time conclusion (range available before fixing mill_operation_tpe)

Property	minimum (minutes)	maximum (minutes)
milling_time	79	90

For a particular bead type, the range of milling time will be dependent on the mill operation type. For example, if the bead type is constrained to be Zircon Oxide (YTZ), the range of available milling times will be as follows:

mill_operation_type selected	milling_time minimum (minutes)	milling_time maximum (minutes)
Continuous Recirculation	(No Solution)	(No Solution)
One Discrete Pass	(No Solution)	(No Solution)
Two Discrete Passes	88	90
Three Discrete Passes	81	90
Four or More Discrete Passes	79	90

Thus, one process choice for meeting the user-specified target constraints is to use Zircon Oxide (YTZ) beads in a mill that operates using three discrete passes for a milling time of 88 minutes. This yields a ps_50_final of 1.00 microns and a ps_90_final of 3.24 microns. Other choices within the solution space will also meet the user-specified constraints.

The invention may be implemented in digital electronic circuitry, or in computer hardware, firmware, software, or in combinations of them. Apparatus of the invention may be implemented in a computer program product tangibly embodied in a machine-readable storage device for execution by a programmable processor; and method steps of the invention may be performed by a programmable processor executing a program of instructions to perform functions of the invention by operating on input data and generating output. The invention may advantageously be implemented in one or more computer programs that are executable on a programmable system including at least one programmable processor coupled to receive data and instructions from, and to transmit data and instructions to, a data storage system, at least one input device, and at least one output device. Each computer program may be implemented in a high-level procedural or object-oriented programming language, or in assembly or machine language if desired; and in any case, the language may be a compiled or

interpreted language. Suitable processors include, by way of example, both general and special purpose microprocessors. Generally, a processor will receive instructions and data from a read-only memory and/or a random access memory. Storage devices suitable for tangibly embodying computer program instructions and data include all forms of non-volatile memory, including by way of example semiconductor memory devices, such as EPROM, EEPROM, and flash memory devices; magnetic disks such as internal hard disks and removable disks; magneto-optical disks; and CD-ROM disks. Any of the foregoing may be supplemented by, or incorporated in, specially-designed ASICs (application-specific integrated circuits).

A number of embodiments of the present invention have been described. Nevertheless, it will be understood that various modifications may be made without departing from the spirit and scope of the invention. For example, other programming languages may be used to implement a formulation knowledge engine. The formulation knowledge engine may be used with a graphical user-based interface or a web-based interface. Material, process, and other data items may be stored in an external database, such as structured query language (SQL) - based database, a spreadsheet, or other data storage system and accessed by program code implementing the formulation engine using standard application programming interfaces (APIs).

The formulation invention described herein may be used to address formulation problems in a variety of industries. Industries that may benefit from the invention include food preparation, building, petroleum, cosmetics, electronics, plastics, material manufacturing, and environmental industries. In the food preparation industry, a formulation engine can be implemented to reformulate combining, cooking, and processing food ingredients as well as to reformulate processes such as fermenting and blending of wine or beer. In the building industry, processes used to produce building products, such as the compounding of cement, sand, and other solid materials with water to produce mortar can be reformulated. In the petroleum industry, chemical blends (e.g., processing and mixing basic oils and additives to prepare motor oil may be reformulated). In the plastics industry, formulation of a molded polymer from polymer beads and plastics additive materials (impact modifiers, pigments, etc). In the environmental management industry, water treatment using resins, settling, and other

SECRET

-

THE UNIVERSITY OF CHICAGO

-

- SECRET

113

2 a processor coupled to a user input device;

3 a database coupled to the processor and comprising instructions to configure the
4 processor to:

5 receive a product formulation script, the script comprising:

6 a component selection option, the selection option comprising a

7 plurality of sets of formulation components,

8 a formulation component constraint identifying a range associated with

9 a formulation component property, and

10 a target constraint; and

11 process the product formulation script to determine a collection of formulation

12 components that can be used to produce a product, the product having a

13 first property in accordance with the target constraint, wherein the

14 collection comprises the first formulation component and the instructions

15 to process the script comprise instructions to:

16 determine a first one of the sets of formulation components for

17 inclusion in the collection; and

18 determine a permitted range associated with the first formulation

19 component in the collection, the permitted range being

20 compliant with the formulation component constraint.
21

0044250 161500205

114

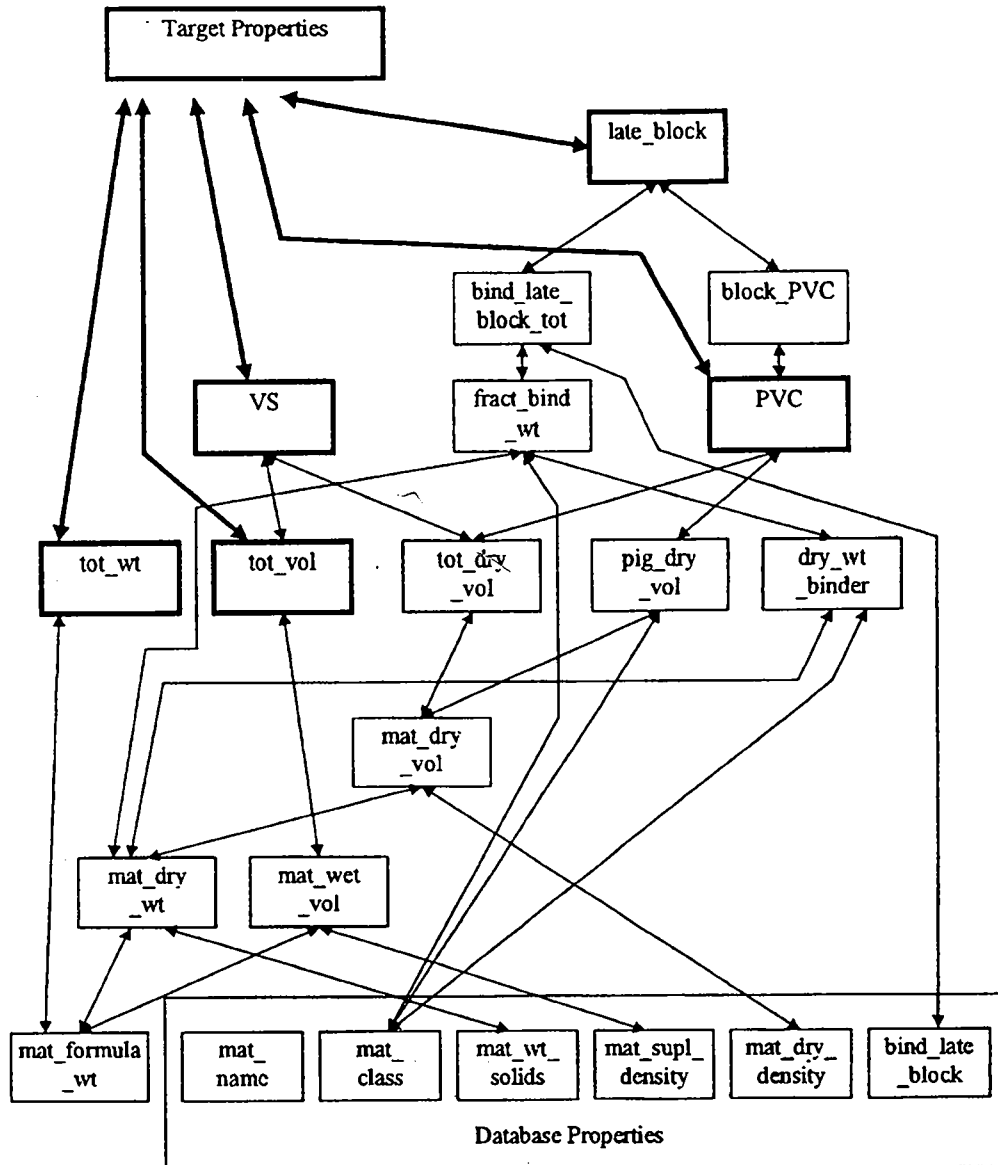
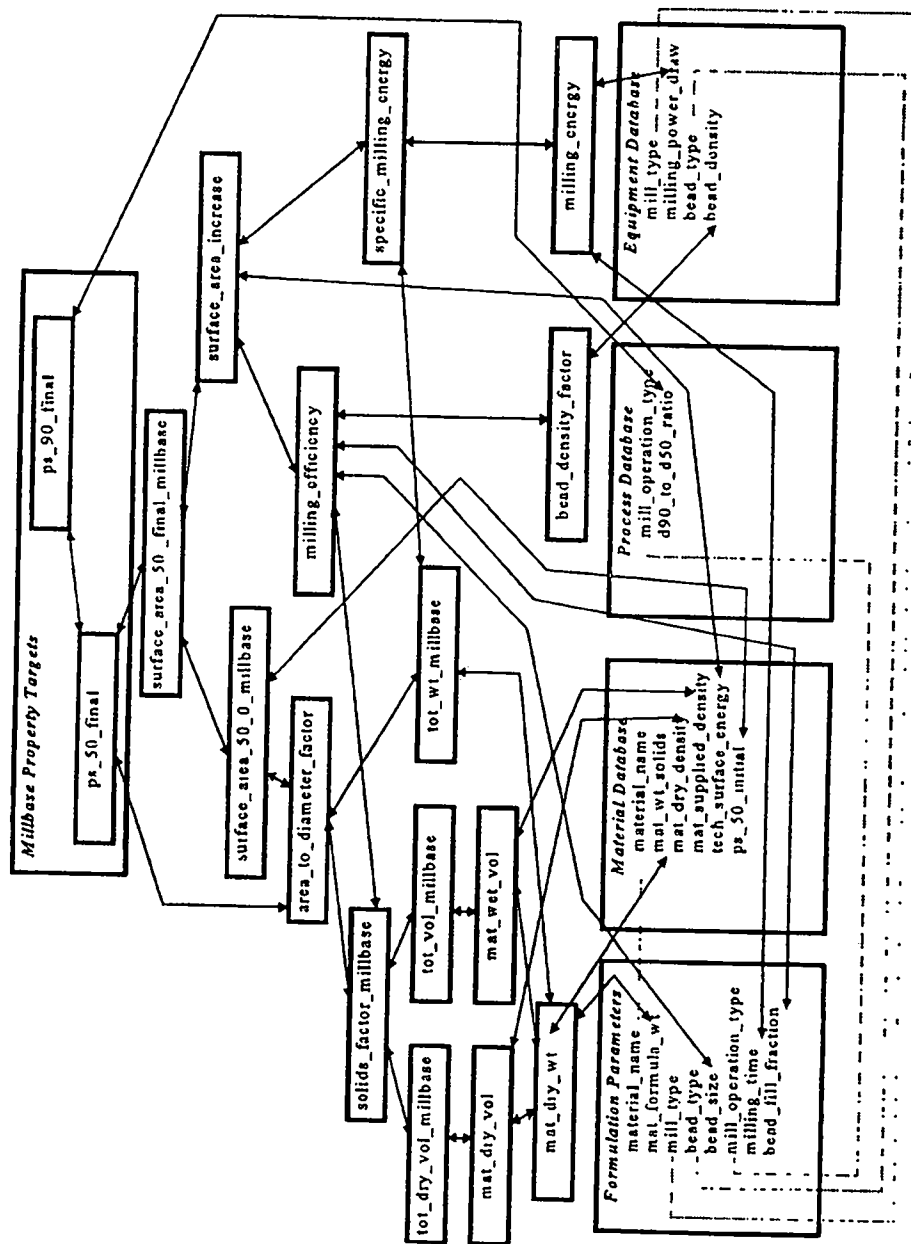
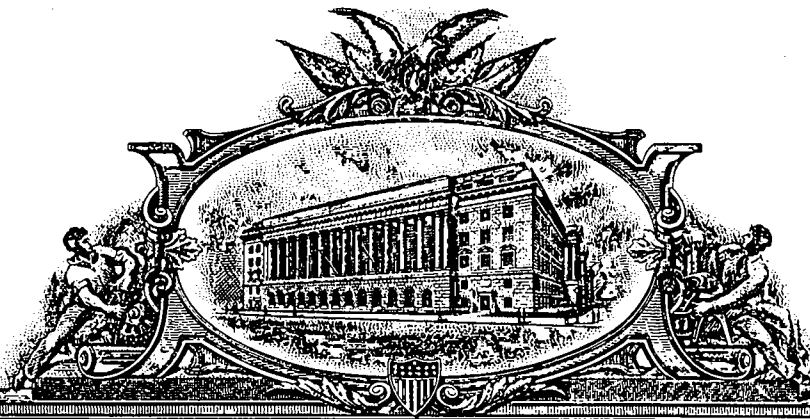


Fig. 1





THE UNITED STATES OF AMERICA

TO ALL TO WHOM THESE PRESENTS SHALL COME:

UNITED STATES DEPARTMENT OF COMMERCE

United States Patent and Trademark Office

February 01, 2001

**THIS IS TO CERTIFY THAT ANNEXED HERETO IS A TRUE COPY FROM
THE RECORDS OF THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK
OFFICE OF THOSE PAPERS OF THE BELOW IDENTIFIED PATENT
APPLICATION THAT MET THE REQUIREMENTS TO BE GRANTED A
FILING DATE UNDER 35 USC 111.**

APPLICATION NUMBER: 09/608,879

FILING DATE: June 30, 2000



**By Authority of the
COMMISSIONER OF PATENTS AND TRADEMARKS**

P. R. GRANT

Certifying Officer

7-3-00

A

117

CERTIFICATE OF EXPRESS MAIL

I hereby certify that this correspondence is being deposited with the United States Postal Service as Express Mail in an envelope addressed to:
 Commissioner for Patents, Washington, D.C. 20231, on June 30, 2000
 Express Mail Mailing Label No. EL478577596US

Signature

Printed Name of Person Signing

Peter Dumont

Peter Dumont

EL478577596US

Patent

Attorney Docket No. 6258/5

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE
 PATENT OPERATION

Commissioner for Patents
 Box Patent Application
 Washington, D.C. 20231

Sir:

PATENT APPLICATION

Transmitted herewith for filing is the patent application under 37 CFR 1.53(b):

Applicants : DR. JOHN W. HOOK, III
 DR. DANIEL PIETRI

For : COMPUTER-BASED PRODUCT FORMULATION

Enclosed are:

- ☒ Specification - 28 pages; Claims - 3 pages; Abstract - 1.
- ☐ Declaration
- ☐ Power of Attorney
 - ☐ Newly executed (original)
 - ☐ Copy from a prior application (for continuation/divisional)
- ☒ (2) sheets of ☒ formal ☐ informal drawings (comprising of Figures 1 through 2).
- ☐ Enclosed is a check in the amount of \$0.00 to cover the Assignment Recordation Fee
- ☐ Small Entity Status Declaration
- ☐ Preliminary Amendment

NYB 1131160.1

JC815 U.S. PTO
 09/608879
 06/30/00

JC833 U.S. PTO
 06/30/00

05 068879 0630000

118

CLAIMS AS FILED

	Number Filed	Number Extra	Rate	Additional Fee	Basic Fee \$690.00
Total Claims	10-20		X \$ 18.00	X \$	= \$ 0.00
Independent Claims	2-3		X \$ 78.00	X \$	= \$ 0.00
First Presentation of Multiple dependent Claims			+ \$260.00		= \$
Total Filing Fee					\$690.00

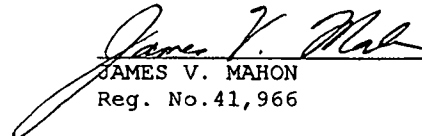
☐ Certified Copy of priority documents, claimed herein.

Applicant hereby claims priority under the International Convention and under 35 USC § 119 based upon the following:

Provisional Patent Application Serial No. 60/206,619, filed
May 24, 2000.

- ☐ Information Disclosure Statement, Form PTO 1449, References
- ☐ If a continuing application, check appropriate box
 - ☐ Continuation ☐ Divisional
 - ☐ Continuation-in-part (CIP)
- ☐ A check in the amount of \$ to cover the filing fee and any additional claim fee is enclosed.
- ☒ The Commissioner is hereby authorized to charge the required fee for the submission of the patent application, or any additional fees or credit any overpayments in connection with this application to Deposit Account No. 50-0521. A duplicate copy of this sheet is enclosed.

Respectfully submitted,


 JAMES V. MAHON
 Reg. No. 41,966

MAILING ADDRESS

CLIFFORD CHANCE ROGERS & WELLS LLP
 200 Park Avenue
 New York, NY 10166-0153
 (212) 878-8073

119

**APPLICATION
FOR
UNITED STATES LETTERS PATENT**

TITLE: COMPUTER-BASED PRODUCT FORMULATION

**APPLICANTS: DR. JOHN W. HOOK, III.,
DR. DANIEL PIETRI.**

"EXPRESS MAIL" Mailing Label Number EL478577596US_

Date of Deposit June 30, 2000

I hereby certify under 37 CFR 1.10 that this correspondence is being deposited with the United States Postal Service as "Express Mail Post Office to Addressee" with sufficient postage on the date indicated above and is addressed to the Commissioner for Patents, BOX PATENT APPLICATION, Washington, D.C. 20231.

Peter D. Hout
Peter D. Hout

NYB 1159221.1

Attorney Docket 006258/00005

COMPUTER-BASED PRODUCT FORMULATION

CROSS-REFERENCE(S) TO RELATED APPLICATIONS

This application claims the benefit of the filing date of U.S. provisional application
5 serial number 60/206,619 entitled "Computer-Based Product Formulation" which was filed on
May 24, 2000.

BACKGROUND OF THE INVENTION

Chemical manufacturers, and manufacturers in other industries, rely on accurate
information about characteristics of the products they produce. Accurate information is
10 needed to determine how products perform under different environmental and usage situations
and is used to guide research and product development. Marketing and informational
literature may also need to accurately disclose product characteristics. To determine the
characteristics of products, and to produce new products with desirable characteristics,
manufacturers rely on the experience and advanced knowledge of research employees (e.g.,
15 analytic chemist). Researchers commonly rely on their knowledge and experience about
existing products and product formulations in order to determine desirable modifications to
existing products. In many cases, however, this may still be a trial-and-error endeavor
requiring research employees to produce samples of modified versions of products and to test
these samples to determine whether they are suitable for sale and mass production. Trial-and-
20 error product development and testing may involve the production of a significant amount of
unusable test products. This can be an expensive process. To reduce the cost in producing
new products, or modifying existing products, automated tools that can help to predict
product characteristics, or which can help to formulate products with particular
characteristics, are desired.

25

SUMMARY OF THE INVENTION

In general, in one aspect, the invention features a computer implemented method of
formulating a product (e.g., a chemical product). The method includes receiving a product
formulation script. The product is formulated from a number of different components and the

script guides the formulation of the product by setting forth, e.g., required and optional components and groups of related alternative components. To provide for such guidance, the script may include (i) a component selection option identifying sets of formulation components, (ii) at least one constraint to identify a numeric range associated with a property of one of the formulation components, and (iii) a target constraint. The product formulation script is processed to determine a collection of formulation components that can be used to produce the product such that one or more properties of the product meet associated target constraint(s). Processing of the script also includes selecting from among optional formulation components. This selection can be performed by determining sets of formulation components to be used in formulating the product and determining a permitted range associated with the formulation components. The permitted ranges enabling the formulated product to meet the target constraint(s).

Implementations may include one or more of the following features. The script may be processed using a formulation knowledge web that interrelates properties of the formulation components and target properties. The formulation component properties (which can be retrieved from a database) include properties of raw materials and properties associated with manufacturing processes. Processing the script can include determining formulation components to be included and/or excluded from a formulation. Ranges identified by constraints may include both ranges of values enabling target constraints to be met and ranges of values that would cause target constraints not to be met. These ranges may identify, e.g., the amount of an ingredient to be included in a formulation. Processing the script also can include determine which target constraint values are attainable and which are not attainable.

The method can be implemented in software using a general or special purpose computer system. The details of one or more embodiments of the invention are set forth in the accompanying drawings and the description below. Other features, objects, and advantages of the invention will be apparent from the description and drawings, and from the claims.

DESCRIPTION OF THE FIGURES

Figs. 1 and 2 are formulation knowledge representation.

122

DETAILED DESCRIPTION OF THE INVENTION

A formulation engine can help to formulate a new chemical composition (a "target composition"). This is done through the processing of static knowledge (SK) and the determination and processing of dynamic knowledge (DK). In general, static knowledge encompasses the known, pre-determined, or use-specified values that are received by the formulation engine, while dynamic knowledge encompasses values determined, and inferences drawn, through processing by the formulation engine. Thus, dynamic knowledge is an explicit or implicit function of static knowledge and/or of other types of dynamic knowledge. Static knowledge can include, e.g., data about the intrinsic properties of various chemical compositions (e.g., mass, volume), manufacturing facilities (e.g., capacity), and manufacturing processes (e.g., temperature). Static knowledge may be represented in a database or received through user inputs. Dynamic knowledge includes similar types of information which may be undetermined prior to computation by the formulation engine. Dynamic knowledge can also include intermediate properties required for a computation. For example, if a specific processing temperature is specified by the user, then that temperature may be considered static knowledge. However, if the user indicates a range of possible values which constrains that processing temperature, then temperature is part of the dynamic knowledge, values of which may vary within the specified range during a computation. Classification of a particular variable as SK or DK is determined by the context of not only the knowledge domain, but also the specific user request.

The formulation engine can help to determine a formulation of a target composition. This determination is based on desired properties ("output constraints") of that target composition and based on specified properties of the constituent ingredients and the manufacturing processes used to produce the target composition ("input constraints"). The formulation engine can process the input constraints, static knowledge, and dynamic knowledge to determine a target formulation composition satisfying the output constraints. For example, in a paint formulation implementation, discussed below, the formulation engine can select from among a set of specified constituent ingredients, and determine amounts for those ingredients, to produce a paint having a block resistance property within a particular range.

The formulation engine determines a target composition using pre-determined and/or dynamically determined associations between static and dynamic knowledge. These associations between SK and DK are referred to as a formulation knowledge web (FKW). In general, processing using this formulation knowledge web involves (1) building the
5 formulation knowledge web (FKW) between SK and DK, and then (2) using the formulation knowledge web (FKW) to solve a formulation problem. Building the formulation knowledge web may include both manual processes (i.e., programming steps by a programmer) and automated steps. In the example described herein, the manually determined relations are specified in the PROLOG IV language, and the automated determination and building of
10 relations can be accomplished using inference-determining functions of the PROGLOG IV programming language.

The relationships between the SK and DK may be represented in a directional or a non-directional manner for processing by the formulation engine. If we have a dynamic knowledge set **DK** of N variables, (DK_n for $n = 1$ to N), and a static knowledge set **SK** of M
15 variable (SK_m for $m = 1$ to M), then the FKW can be represented as a series of functions:

$$DK_n = f(SK_m)$$

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

To fully calculate formulation recommendations, the formulation engine also may use the inverse functions:

20 $SK_m = f'(DK_n)$

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

In a non-directional representation, such as the Prolog IV example below, these inverse functions are implied explicitly by the direct functions. In a less sophisticated representation, such as one might do in another language, these inverse functions could be
25 built by the programmer or by the formulation engine.

The formulation knowledge web used in a particular implementation will differ depending on the particular implementation. For example, an implementation directed to formulating paint will have a different formulation knowledge web than an implementation directed to producing agricultural chemicals. In the discussion that follows, a generally
30 applicable principal for building a formulation knowledge web is discussed, followed by

implementation-specific examples. This general principle can be directly applied to, or adapted for, a variety of different problem domains.

The general principle of building a formulation knowledge web involves allocating variables to represent static and dynamic knowledge, and establishing relations between those variables. For example, a variable SK_i can be created for each item of static knowledge. Similarly, a variable DK_i can be created for each item of dynamic knowledge. The variables SK_i and DK_i may be allocated by a programmer using a PROLOG IV declaration, or the variables may be dynamically determined based on inferences drawn during PROLOG IV processing. Each variable (DK_i) may have associated constraints that define a domain of valid settings of that variable. For example, the variable DK_i may be constrained to have values between 1 and 10. Relations between variables also may be defined by a set of constraints (e.g. numerical, Boolean).

Once the FKW has been constructed, the Formulation Engine can use the FKW to process the specific user request such as DK calculation (concluding all possible values for DK_n) or DK optimization (concluding which value of DK_m is needed to optimize DK_n).

A simple example of relations between variables and the use of constraints is illustrated by a calculation of Formulation Total Weight (TW). Formulation total weight is the weight of a target composition and can be determined as a sum of the weights of the individual materials in the target composition. Thus, for a target composition composed of a set of n materials, TW can be calculated as follows:

$$TW = \sum_1^n MW_i$$

As a simple example, assume that TW can be formed from two individual materials MW_1 and MW_2 , and that the user has specified the following constraints: $1000 \leq TW \leq 1050$; $MW_1 = 800$; and $100 \leq MW_2 \leq 300$. The formulation engine processes this information and determine a formulation of MW_1 and MW_2 satisfying their constraints and the constraints on TW. In this case, the formulation engine recognizes that, based on the input constraints, MW_1 must have the fixed value of 800, and, to satisfy constraints on MW_2 and TW, MW_2 can have a value between 200 and 250. Combining MW_1 and MW_2 according to these results will produce a target composition with a weight of between 1000 and 1050.

125

A formulation engine can determine chemical product formulation information using a database storing knowledge about characteristics of, and interrelationships between, various raw materials, product applications, manufacturing processes, and chemical product formulations. These characteristics and interrelationships may be implemented by
5 interconnecting different variables in a knowledge "web." This "web" is referred to herein as a formulation knowledge web.

The foregoing example illustrates the use of a formulation knowledge web for selection of material quantity. Implementations may also use a formulation knowledge web to select from among different materials or process options. For example, two different materials
10 X and Y, each with its own constraints and properties, may satisfy a constraint associated with a target composition. A formulation knowledge web may be used to determine which of X and Y will, in fact, satisfy constraints of the target composition. Thus, a formulation knowledge web can represent knowledge about material selection, as well as quantitative calculation (e.g. material quantity, property value).

15 Treating both material (or process) selection and quantitative calculation at the same level of the algorithm is useful in building the FKW so that the formulation engine can simultaneously consider both the selection and the quantity needed in the user request. This can be done, for example, by expressing the material or process choice in numerical terms such as its rank (r_i) in the list of allowed choices. The selection then becomes a numerical
20 function of dynamic knowledge (DK) and the FKW then is fully numeric.

Problem Solving

Determining formulation properties using the formulation engine can include calculating a resulting set of domains (i.e., intervals) for each of a set of factors (expressed as variable) influencing the formulation property. These domains may be associated with
25 variables in an interface variable group (IVG). Example IVG variables can include material names, material quantities, formulation property values, and formulation and manufacturing process values.

In some implementations, calculating intervals can be performed by enumerating all values of variables, and then calculating results for each enumeration (i.e., the result may be
30 determined using all permutations of permitted variable values). For example, if X and Y are

integer variables used to calculate Z , and $1 \leq X \leq 2$, and $1 \leq Y \leq 3$, then calculating the interval of Z requires calculating Z for six different (X,Y) combinations (1,1), (1,2), (1,3), (2,1), (2,2), and (2,3).

A more complex challenge is presented by solving the total weight example above.

5 While enumeration of the entire range would be possible, it is better to initially use a numeric solver which takes advantage of interval arithmetic and fixed point algorithm. In such a case, a numerical solver could make the following deductions:

- MW_1 is fixed at 800 by the initial constraint.
- MW_2 is in the range [100, 300] inclusive by the initial constraint.
- 10 • From the addition definition of TW , TW is bounded by the minimum value of 900 and the upper bound of 1100 ,
- From the initial constraint on TW we know TW is bounded by 1000 and 1050.
- Based on the two TW bounds in the previous two bullets, the largest minimum bound on TW is 1000, the smallest maximum bound is 1050,.
- 15 • MW_2 is bound by the TW definition, the fact that MW_1 is fixed at 800, the previous conclusion that TW is in the range [1000, 1050] inclusive. So MW_2 is bounded by the [200, 250] inclusive.
- No further reductions of the variable ranges are possible so the solver stops.

In this example the solver has correctly concluded the range on MW_2 . However, in
20 the general case, numerical solvers may not be able to conclude the actual minimum ranges, so the solver may be combined with an enumeration algorithm which explores the reduced constraint set from the solver. This may be accomplished using a classical interval partitioning algorithm. This combination of range calculation and numeric enumeration then achieves the final reduction of the ranges more efficiently than enumeration alone, since it does not have to
25 search the entire initial constraint space, and more reliably than interval arithmetic alone. Again, it is clear that treating material or process selections as numeric variables DK_n in the FKW places the selection of a specific material or process element at the same level as the numeric constraints.

Modern programming languages supporting constraint logic programming and interval
30 arithmetic, such as the Prolog IV language, can automate such interval calculations. In the

disclosure that follows, a Prolog IV-based formulation engine is described herein.

Implementations may use other programming languages.

Dynamic Knowledge (DK) optimization

The formulation engine can perform dynamic knowledge optimization to find a value
5 of a numerical variable (V_i) that optimizes a particular formulation characteristic. An optimum
value of a variable V_i is affected by the variable's direct and indirect relationships to other
variables (this corresponds to direct and indirect relationships between DK elements).

Implementations can use one or more optimization algorithms to find an optimum value for a
variable. In general, an optimization algorithm that can provide a true optimal value is
10 desirable (preferably, the selected algorithm should provide true optimization even in the
presence of local optimums). The formulation engine can provide for optimization of a
variable and can identify a current domain of the other variables needed to obtain this
optimization.

The Branch and Bound Algorithm is a well known example of such an optimization
15 algorithm which can find a true optimal value even in the presence of local optimums. The
enumeration algorithm defines a search tree and uses the Branch and Bound strategy to find
the optimum for this iteration. That optimum (O_n) becomes a boundary for the next iteration,
so the algorithm adds a new constraint stating that $O_{n+1} > O_n$. The iteration continues until the
tree is completed.

Paint Formulation Implementation:

The operation of a formulation engine adapted for formulating paint products will now
be detailed. In this example, the formulation engine is used to select a paint binder that can
give good late block resistance to a paint while maintaining volume (V), volume solids (VS)
and pigment volume content (PVC) within desired target ranges. The paint product
25 formulation engine determines the paint binder using a database of raw material characteristics
(each of which may be expressed by a different field in a database record), and a formulation
knowledge web expressing knowledge of the different factors that affect the late block
resistance.

Fig. 1 shows an example formulation knowledge web that captures paint formulation knowledge. Program source code and database values for an implementation of this formulation knowledge web are shown in Table 1.

Table 1: Prolog IV Program Code

```

5  /* 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]).
10 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]).
15 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-
20 2020','Thickener',[0.2,1.0426,1.2569,0]).
/* End of Database of Materials */

/* Relationships */

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

mat_class(V):-
    material(_,_,V,_).
30 mat_wt_solids(V,[V,_,_,_]).

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

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

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

40 /* 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]]):-
45 % Gets data
    mat_supplied_density(D,Supp_Dens),
    mat_dry_density(D,Dry_Dens),

```

129

```
mat_wt_solids(D,Wt_Sol),
% Sets Interval Solver Relationships
Wet_Vol = Formula_Wt./Supp_Dens,
Dry_Wt = Formula_Wt.*Wt_Sol,
5   Dry_Vol = Dry_Wt./Dry_Dens,
build_material_quantity(Data_Quant_List).

/* Builds Total Weight Relation */
10  tot_wt([],0).
tot_wt([[D,Q]|Data_Quant_List],V):-
    mat_formula_wt([D,Q],FW),
    V = FW+.V1,
15  tot_wt(Data_Quant_List,V1).

/* Builds Total Volume Relation */
20  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).
25

/* Builds Total Dry Volume Relation */
30  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).
35

/* Builds Pigment Dry Volume Relation */
pig_dry_vol(Pigment_Data_Quant_List,V):-
    tot_dry_vol(Pigment_Data_Quant_List,V).
40

/* Builds Total Dry Weight Relation */
tot_dry_wt([],0).
45  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).
50
```

/* Builds Dry Weight Binder Relation */

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

5

/* Builds Quantity Relations for Binders */

build_fract_bind_wt_quantity([],_).

10 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).

15

/* Builds Volume Solids Relation */

vs(Formulation_Data_Quant_List,V) :-
tot_dry_vol(Formulation_Data_Quant_List,TDV),
20 tot_vol(Formulation_Data_Quant_List,TV),
V = TDVA./.TV.

/* Builds Pigment Volume Content Relation */

25

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.

30

/* Builds block PVC Relation */

35 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)).

40

/* Builds Binder Late Block Relation */

bind_late_block_tot([],0).

45 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).

50

```

/* Builds Late Block Relation */
late_block(Binder_Data_Quant_List,
5  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,
BPVC),
10  V = BLBT.+BPVC.*(10.-BLBT).

```

The formulation engine can access a database of raw materials to determine inherent characteristics of the raw materials as well as uses for those materials. For example, the program code of Table 1 includes a database of twelve raw materials. This database includes

15 the name, classification, solid fraction, supplied density, dry density and late block resistance characteristics of each material. The following table, more fully explained below, shows the content of this example material database:

Table 2

Mat_name	Mat_Class.	mat_wt_solids	mat_suppli ed_density	mat_dry _density	bind_la te_bloc k
Water	Water	0	1	1	
Propylene Glycol	Solvent	0	1.036	1.039	
Skane M-8	Biocide	0.45	1.032	1.0345	
Tamol 731	Dispersant	0.25	1.104	1.605	
Triton CF-10	Surfactant	1	1.05	1.05	
Ti-Pure R-700	TiO2	1	4	4	
ASP-170	Extender	1	2.58	2.58	
Rhoplex HG-74D	Binder	0.42	1.032	1.0715	7
Rhoplex HG-95P	Binder	0.465	1.0608	1.1429	9
Rhoplex Multilobe 200	Binder	0.535	1.0648	1.1215	2
Texanol	Coalescent	0	0.95	0.95	
Acrysol RM-2020	Thickener	0.2	1.0426	1.2569	

132

The Table 1 source code also includes a set of six functions to access information from the materials database. These functions are shown in pseudo-code form and further explained as follows:

Functions to Access Materials Database:

- 5 `mat_name(i)`: Accesses a unique name associated with a material.
- `mat_class(i)`: Accesses classification information about the material. The classification information may identify uses of the material. In Table 1, material classifications include "Water", "Solvent" Binder", etc.
- `mat_wt_solids(i)`: Returns the weight fraction of material (i) which is solid
- 10 `mat_supplied_density(i)`: Returns the density (kg/li) of a material in it's supplied form (liquid or solid)
- `mat_dry_density(i)`: Returns the density (kg/liter) of the dry solids of the material in a paint film.
- `bind_late_block(i)`: Returns the late block resistance of an 18 PVC gloss paint
- 15 formulation based on binder (i)

In this example, a basic unit of each material is weight. For a particular formulation of materials, the total material formulation is the material formulation weight expressed as:

`mat_formula_wt(i)` is the weight of the material (i) in the formulation.

- The formulation engine processes a formulation knowledge web that interrelates the
- 20 materials as well as knowledge about target product formulation and manufacturing processes. In the example herein, the formulation knowledge web includes a representation of the following formulation knowledge:

The dry weight of a specific material is:

$$\text{mat_dry_wt}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) * \text{mat_wt_solids}(i)$$

- 25 The volume contribution of a specific material(i) in the wet paint is:

$$\text{mat_wet_vol}(i) = \text{mat_formula_wt}(i) / \text{mat_supplied_density}(i)$$

The volume contribution of a specific material (i) in the dry paint is:

$$\text{mat_dry_vol}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{mat_dry_density}(i)$$

The total weight of the paint is the sum of the individual material weights:

- 30 $\text{tot_wt} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_formula_wt}(i)$

The total volume of the paint is the sum of the individual material wet volumes:

$$\text{tot_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_wet_vol}(i)$$

The total dry volume of the paint is the sum of the individual dry volumes:

$$\text{tot_dry_vol} = \sum_{\text{all materials}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

- 5 The dry volume of pigment in the paint is a similar sum, applied only to the pigments:

$$\text{pig_dry_vol} = \sum_{\text{pigments}} \text{mat_dry_vol}(i)$$

The dry weight of the binder in the paint is:

$$\text{dry_wt_binder} = \sum_{\text{all binders}} \text{mat_dry_wt}(i)$$

The binder fraction of a specific binder (i) is:

10
$$\text{fract_bind_wt}(i) = \text{mat_dry_wt}(i) / \text{dry_wt_binder}$$

The Volume Solids of the formulation (VS) is:

$$\text{VS} = \text{tot_dry_vol} / \text{tot_vol}$$

The Pigment Volume Content of the formulation (PVC) is:

$$\text{PVC} = \text{pig_dry_vol} / \text{tot_dry_vol}$$

- 15 In some cases, a material's effect on the characteristics of a formulation may be represented by a series of different formulas, the particular formula to be applied depending on the concentration of the material in the formulation. For example, the association between PVC and block resistance can depend on the concentration of PVC and may be expressed by the following set of relationships:

tot_PVC_add	block_PVC
PVC < 30%	0
30% ≤ PVC ≤ 40%	(tot_PVC - 0.3) * 10
PVC > 40%	1

20

The binder contribution to block resistance is:

$$\text{bind_late_block_tot} = \sum_{i=\text{binders}} (\text{bind_late_block}(i) * \text{fract_bind_wt}(i))$$

The target property, Late Block, is:

$$\text{late_block} = \text{bind_late_block_tot} + \text{block_PVC} * (10 - \text{bind_late_block_tot}).$$

25

The formulation engine may determine formula characteristics, and may help to determine a modified formulation based on a product formulation script. The product

134

formulation script can outline a recipe (i.e., a list of materials or ingredients) that can be used to formulate a product, constraints on particular ingredients in the recipe, options for selection from among materials, and constraints on the output product that is produced. An example list of ingredients can include the following ingredients in a basic paint formulation recipe:

5

Table 3: Starting Point Formulation

Material	Weight
Water	5.00
Propylene Glycol	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
Water	20.00
Rhoplex HG-74D	529.00
Texanol	30.00
Acrysol RM-2020	40.00
Water	121.00

The expected properties of this starting point formulation can be calculated by the formulation engine using the formulation knowledge web of Fig. 1 (as expressed by the program code of Table 1). These starting point properties are as follows:

Property	Value
Total Weight (kg)	1003.00
Total Volume (l)	833.95
Volume Solids (%)	32.79
PVC (%)	18.28
Late Block (0 to 10)	7.00

135

A user may wish to determine a new paint formulation by modifying the starting point formulation based on a set of user-specified constraints. The product formulation script can identify user-specified constraints such as these material choice and material level constraints.

A material choice constraint specify groups of materials that are, to some degree, interchangeable. However, specific choices within a group may have different properties. The formulation engine can determine the specific members of a group that should be selected to satisfy user-specified formulation constraints. Material classification information in the raw materials database can be used to determine suitable materials for inclusion within a group. As an example, the database of Table 2 identifies three different binders. In modifying the starting point formulation of Table 3, a user can specify that the binder ("Rhoplex HG-74D" in Table 3) may be altered by the formulation engine and may be one of the three binders(i) Rhoplex HG-74D, (ii) Rhoplex HG-95P or (iii) Rhoplex Multilobe 200. The user may also specify material level constraints; (e.g., "the weight of the binder is to be between 400 and 600 kg inclusive). For our example, the following additional constraints are specified:

Water Level Constraint:

Let the weight of the last water in the formulation be between 0 and 300 kg inclusive.

Other Materials:

Let all other material choices and levels in the starting point be fixed to their initial values given in the formulation of Table 3.

In addition to specifying constraints on the input materials, the user can specify target constraints for the formulated (output) product. In our example, these constraints are as follows:

Let the Total Weight be any value (unconstrained);

Let the Total Volume be between 833 and 835 inclusive;

Let the Volume Solids be between 32.5% and 33.0% inclusive;

Let the PVC be less than or equal to 18.5%; and

Let the Late Block be greater than or equal to 7.0.

From our starting point formulation constraints, the formulation system, using the program knowledge in Table 1, can conclude that the following two solution spaces satisfy the user-specified input and target product constraints:

Solution #1:

Solution #1 is a formulation in which the formulation engine has selected Rhoplex HG-74D as the binder. The resultant formulation "space" is as follows:

Material	Min Weight	Max Weight
Water	5.00	5.00
Propylene Glycol	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
Water	20.00	20.00
<i>Rhoplex HG-74D</i>	<i>522.04</i>	<i>534.35</i>
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
Water	<i>114.86</i>	<i>128.79</i>

The specific properties of a paint produced according to solution #1 will depend on the specific material levels selected and will have the following ranges:

Property	Min Value	Max Value
Total Weight (kg)	989.90	1016.14
Total Volume (l)	833.00	835.00
Volume Solids (%)	32.50	33.00
PVC (%)	18.15	18.47
Late Block (0 to 10)	7.00	7.00

Solution 2

Solution #2 is a formulation in which the formulation engine has selected Rhoplex HG-95P as the binder. The resultant formulation space is as follows:

Material	Min Weight	Max Weight
Water	5.00	5.00

132

Propylene Glycol	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
Water	20.00	20.00
Rhoplex HG-95P	502.94	514.80
Texanol	30.00	30.00
Acrysol RM-2020	40.00	40.00
Water	147.35	160.53

The specific properties of a paint produced according to solution #2 will depend on the specific material levels selected and will have the following ranges:

Property	Min Value	Max Value
Total Weight (kg)	1003.29	1028.33
Total Volume (l)	833.00	835.00
Volume Solids (%)	32.50	33.00
PVC (%)	18.15	18.47
Late Block (0 to 10)	9.00	9.00

Rejected Choices

The formulation engine also determines that binder Rhoplex Multilobe 200 cannot satisfy the specified constraint. Therefore, the formulation engine rejects Rhoplex Multilobe 200 as a binder. In the case of Rhoplex Multilobe 200, the formulation knowledge web can determine that, for the specified constraints:

$$\text{bind_late_block} = 2$$

$$\text{fract_bind_wt} = 1$$

$$\text{block_PVC} = 0$$

This results in the conclusion that $\text{bind_late_block_tot} = 2$ and that $\text{late_block} = 2$. This is not a valid result due to the specified constraint requiring the late_block to be at least 7.

Consequently, Rhoplex Multilobe 200 is rejected by the formulation engine.

138

As seen from the above-example, using the user-specified constraints, formulations meeting those constraints can be determined. However, characteristics of the determined formulation solutions may not span the entire space permitted by a constraint. For example, although the initial constraints indicated that between 400 and 600 kg of binder may be included, if this range was, in fact, used in the solution formulations, other constraints may be violated. To provide further formulation guidance, the formulation engine can provide revised input level constraints to ensure that a formulation solution does, in fact, meet desired constraints. In this example, the formulation engine can make the following determinations:

- The Binder should be either Rhoplex HG-74D or Rhoplex HG-95P.
- The binder weight should be between 522.04 and 534.16 kg when using Rhoplex HG-74D and 502.94 to 514.61 kg when using Rhoplex HG-95P
- The water weight should be between 116.01 and 127.48 when using Rhoplex HG-74D and 148.50 and 159.26 when using Rhoplex HG-95P.
- The Total Weight will be between 1001.49 and 1016.22
- The Volume will be between 833 and 835 (same as input constraint)
- The Volume Solids will be 32.50 and 32.97
- The PVC will be between 18.21% and 18.46% (tighter than input)
- The Late Block Resistance will be between 7 and 9 (tighter than input)

If a user subsequently constrains the Late Block Resistance further to be above 8, the formulation engine will conclude that the correct binder will be Rhoplex HG-95P and characteristics of the resultant product will have the numeric constraints expressed above. Thus, the formulation engine can be used to determine appropriate materials and material levels to meet both input and target property constraints. Depending on the complexity of problems to be solved, implementations may use larger numbers of paint performance properties and raw materials and levels.

The following code show essential details of PROLOG IV product formulation script that specifies the basic paint formulation recipe of Table 3, as well as permitted constraints and options for formulating a paint using that basic recipe.

```
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],
5 [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],
10 [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],
15 /* 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]],
20
/* The following commands identify the output data */
/* being requested and output constraints */

/* Total volume range 833-835 */
25 [['Total Volume',833,835,_,_],
/* Total Weight is unconstrained */
['Total Weight',_,_,_,_],
/* Total PVC may be up to 18.5 % */
['Total PVC',_,0.185,'Percent',_],
30 /* 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',_],
],[]).
35

```

Implementations may include a graphical user interface front-end to generate the preceding input and query code.

Millbase Implementation:

In addition to selection and determination of materials and material levels, a formulation engine can be used to determine the manufacturing, application, and formulation processes to be used for a particular material. In the example that follows, an implementation of the formulation engine is used to determine characteristics of a millbase for use in herbicide preparation.

140

In the preparation of herbicides for use in agricultural applications one of the process steps is the preparation of a millbase. A key property of the final millbase is the particle size distribution, which largely determines other key properties of the final formulation such as viscosity profile, stability, and suspensibility. This distribution can be represented by the 50th percentile size and the 90th percentile size. The 50th percentile size is the size for which 50% of the particles are smaller. The 90th percentile size is the size for which 90% of the particles are smaller) (these sizes are represented by the variables ps_50_final and ps_90_final, respectively).

The final particle size of a millbase can be predicted from the power draw of the specific mill used, the density of the beads in the mill, the process method in which the mill is used, the milling time, the initial particle size distribution, and a number of other equipment, process, and material properties. A set of variables and equations representing this type of knowledge is expressed for a single active ingredient millbase below:

Equipment Database

An equipment database identifies mill equipment and associated properties. The equipment database may include the following data fields:

- mill_type: unique name of the mill used to grind the millbase
- milling_power_draw: maximum power drawn by this mill_type
- bead_type: unique name of the type of beads used
- bead_density: density of the beads used

For this example, the equipment database is populated as follows:

mill_type	mill_power_draw (Watts)
Dynomill KD-15 (15 L)	11,250
Dynomill KD-50 (49 L)	18,750
Netzsch LMC 20 (20 L)	7,500
Netzsch LMC 60 (50 L)	18.750

bead_type	bead_density (g/ml)
Sand	2.5

141

Glass - unleaded	2.5
Flint Pebble	2.6
Glass - leaded	3.6
Zircon Oxide (YTZ)	6.0
Tungsten Carbide	15.0

Process Database

A process database identifies particular milling processes and characteristics of those processes. The process database may include the following data fields:

- mill_operation_type: Unique name identifying a particular method of running a mill.
- 5 d90_to_d50_ratio: Expected ratio of the 90th percentile size to the 50th percentile size for a particular method of running the mill.

For this example, the process database may be populated as follows:

mill_operation_type	d90_to_d50_ratio
Continuous Recirculation	4.00
One Discrete Pass	3.75
Two Discrete Passes	3.50
Three Discrete Passes	3.25
Four or More Discrete Passes	3.00

10 Material Database

A Material database includes characteristics of raw materials. The materials database may include the following data fields:

- mat_name: unique name of the material in the formulation
- 15 mat_wt_solids : weight fraction of solids of the material
- mat_dry_density: density of the material in the dry formulation
- mat_supplied_density: density of the material in its supplied form
- tech_surface_energy: surface energy of the technical active material in the millbase

ps_50_initial: particle size of the technical active material in the millbase

For this example, the materials database is populated as follows:

mat_name	mat_wt_solids	mat_dry_density (g/ml)	mat_supplied_density (g/ml)	tech_surface_energy (J/m ²)	ps_50_initial (microns)
Goal Tech	100%	1.45	1.45	0.04	15
Kelzan	100%	1.50	1.50		
Proxel GXL	25.3%	1.00	1.13		
Water	0%	1.00	1.00		

- 5 Properties of a prepared millbase may be determined, in part, based on a set of initial properties associated with various manufacturing-related variables. These variables may include the following:

material_name	mat_formula_wt	mill_type	bead_type
bead_size	mill_operation_type	milling_time	bead_fill_fraction

- These variables can be used to calculate a set of intermediate properties of the millbase. The intermediate properties, and the calculations to obtain these properties, can include the following:

$$\begin{aligned}
 \text{mat_dry_wt}(i) &= \text{mat_formula_wt}(i) * \text{mat_wt_solids}(i) \\
 \text{mat_dry_vol}(i) &= \text{mat_dry_wt}(i) / \text{mat_dry_density}(i) \\
 \text{mat_wet_vol}(i) &= \text{mat_formula_wt}(i) / \text{mat_supplied_density}(i) \\
 \text{tot_dry_vol_millbase} &= \sum_{\text{all materials in millbase}} \text{mat_dry_vol}(i) \\
 \text{tot_vol_millbase} &= \sum_{\text{all materials in millbase}} \text{mat_wet_vol}(i) \\
 \text{tot_wt_millbase} &= \sum_{\text{all materials in millbase}} \text{mat_formula_wt}(i) \\
 \text{solids_factor_millbase} &= \text{tot_dry_vol_millbase} / \text{tot_vol_millbase} \\
 \text{bead_density_factor} &= \text{bead_density} / 2.5 \\
 \text{milling_energy} &= \text{milling_power_draw} * \text{milling_time} \\
 \text{specific_milling_energy} &= \text{milling_energy} / \text{tot_wt_millbase}
 \end{aligned}$$

milling_efficiency = solids_factor_millbase * bead_density_factor * bead_fill_fraction
* bead_size

area_to_diameter_factor_millbase = 0.006 * solids_factor_millbase / tot_wt_millbase

surface_area_increase = (milling_efficiency * specific_milling_energy) /

5 tech_surface_energy

surface_area_50_0_millbase = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase /
ps_50_initial

surface_area_50_final_millbase = surface_area_50_0_millbase + surface_area_increase

Final particle sizes can be calculated from the intermediate properties as follows:

10 ps_50_final = 1,000,000 * area_to_diameter_factor_millbase /
surface_area_50_final_millbase

ps_90_final = ps_50_final * d90_to_d50_ratio

These relationships are shown in Fig. 2. Program code implementing this example follows from the teachings of the program code of Table 1. In this example, knowledge about
15 material, process and equipment characteristics are interrelated. Material choice and level are represented by material_name and mat_formula_wt. Process choice and parameters are given by mill_operation_type and choices of milling time and bead_fill_fraction. Equipment choices and parameter are given by the mill_type and bead_type choices and the bead_size parameter.

20 Use of the above-described formulation knowledge web and databases will now be described. In the example that follows, a formulation knowledge web is used to determine processes and equipment that can result in desired target particle sizes for ps_50_final and PS_90_final.

25 Use of the millbase formulation knowledge web may begin with user-selection of a set of initial constraints. For this example, the user-selected constraints include the following material, target millbase, equipment choice, equipment parameter, process choice, and process parameter constraints:

144

User-Specified Material Constraints:

material_name	mat_formula_wt min (kg)	mat_formula_wt max (kg)
Goal Tech	49.95	49.95
Kelzan	0.05	00.05
Proxel GXL	0.05	00.05
Water	49.95	49.95

User-Specified Target Millbase Constraints:

Property	minimum (microns)	maximum (microns)
ps_50_final	0.9	1.1
ps_90_final		3.5

5 User-Specified Equipment Choice Constraints:

Equipment Type	Allowed Choices
mill_type	Dynomill KD-15 (15 L)
bead_type	Glass - unleaded Glass - leaded Zircon Oxide (YTZ)

User-Specified Equipment Parameter Constraint:

Property	minimum (mm)	maximum (mm)
bead_size	1	1

145

User-Specified Process Choice Constraints

Process Type	Allowed Choices
mill_operation_type	Continuous Recirculation One Discrete Pass Two Discrete Passes Three Discrete Passes Four or More Discrete Passes

User-Specified Process Parameter Constraints:

Property	minimum	maximum
milling_time (minutes)	30	90
bead_fill_fraction	0.8	0.8

5 Given these constraints, the databases and the relationships the formulation engine can dynamically determine the processes needed to achieve the target particle sizes. Based on the described formulas and constraints, the formulation engine may reach the following conclusion with respect to mill operation type and operation time:

mill_operation_type conclusion:

mill_operation_type	result
Continuous Recirculation	(No Solution)
One Discrete Pass	(No Solution)
Two Discrete Passes	Can Meet Constraints
Three Discrete Passes	Can Meet Constraints
Four or More Discrete Passes	Can Meet Constraints

10 milling_time conclusion (range available before fixing mill_operation_tpe)

Property	minimum (minutes)	maximum (minutes)
milling_time	79	90

For a particular bead type, the range of milling time will be dependent on the mill operation type. For example, if the bead type is constrained to be Zircon Oxide (YTZ), the range of available milling times will be as follows:

mill_operation_type selected	milling_time minimum (minutes)	milling_time maximum (minutes)
Continuous Recirculation	(No Solution)	(No Solution)
One Discrete Pass	(No Solution)	(No Solution)
Two Discrete Passes	88	90
Three Discrete Passes	81	90
Four or More Discrete Passes	79	90

Thus, one process choice for meeting the user-specified target constraints is to use Zircon Oxide (YTZ) beads in a mill that operates using three discrete passes for a milling time of 88 minutes. This yields a ps_50_final of 1.00 microns and a ps_90_final of 3.24 microns.

Other choices within the solution space will also meet the user-specified constraints.

The invention may be implemented in digital electronic circuitry, or in computer hardware, firmware, software, or in combinations of them. Apparatus of the invention may be implemented in a computer program product tangibly embodied in a machine-readable storage device for execution by a programmable processor; and method steps of the invention may be performed by a programmable processor executing a program of instructions to perform functions of the invention by operating on input data and generating output. The invention may advantageously be implemented in one or more computer programs that are executable on a programmable system including at least one programmable processor coupled to receive data and instructions from, and to transmit data and instructions to, a data storage system, at least one input device, and at least one output device. Each computer program may be implemented in a high-level procedural or object-oriented programming language, or in assembly or machine language if desired; and in any case, the language may be a compiled or interpreted language. Suitable processors include, by way of example, both general and special purpose microprocessors. Generally, a processor will receive instructions and data from a read-only memory and/or a random access memory. Storage devices suitable for tangibly embodying computer program instructions and data include all forms of non-volatile memory, including by way of example semiconductor memory devices, such as EPROM, EEPROM, and flash memory devices; magnetic disks such as internal hard disks and

147

removable disks; magneto-optical disks; and CD-ROM disks. Any of the foregoing may be supplemented by, or incorporated in, specially-designed ASICs (application-specific integrated circuits).

5 A number of embodiments of the present invention have been described. Nevertheless, it will be understood that various modifications may be made without departing from the spirit and scope of the invention. For example, other programming languages may be used to implement a formulation knowledge engine. The formulation knowledge engine may be used with a graphical user-based interface or a web-based interface. Material, process, and other data items may be stored in an external database, such as structured query language (SQL) -
10 based database, a spreadsheet, or other data storage system and accessed by program code implementing the formulation engine using standard application programming interfaces (APIs).

The formulation invention described herein may be used to address formulation problems in a variety of industries. Industries that may benefit from the invention include food
15 preparation, building, petroleum, cosmetics, electronics, plastics, material manufacturing, and environmental industries. In the food preparation industry, a formulation engine can be implemented to reformulate combining, cooking, and processing food ingredients as well as to reformulate processes such as fermenting and blending of wine or beer. In the building industry, processes used to produce building products, such as the compounding of cement,
20 sand, and other solid materials with water to produce mortar can be reformulated. In the petroleum industry, chemical blends (e.g., processing and mixing basic oils and additives to prepare motor oil may be reformulated). In the plastics industry, formulation of a molded polymer from polymer beads and plastics additive materials (impact modifiers, pigments, etc). In the environmental management industry, water treatment using resins, settling, and other
25 processes can be reformulated. In general all of these examples involve formulation of one or more materials or composite materials from one or more ingredient materials, along with information on the process steps, conditions and equipment used in the preparation. In the claims that follow, these ingredients and processes are referred to as formulation components. Accordingly, other embodiments are within the scope of the following claims.

148

WHAT IS CLAIMED IS:

- 1 1. A computer implemented method of formulating a product, the method comprising:
2 receiving a product formulation script, the script comprising:
3 a component selection option, the selection option comprising a plurality of sets of
4 formulation components,
5 a formulation component constraint identifying a range associated with a
6 formulation component property, and
7 a target constraint; and
8 processing the product formulation script to determine a collection of formulation
9 components that can be used to produce a product, the product having a first property
10 in accordance with the target constraint, wherein the collection comprises the first
11 formulation component and processing the script comprises:
12 determining a first one of the sets of formulation components for inclusion in
13 the collection; and
14 determining a permitted range associated with the first formulation component
15 in the collection, the permitted range being compliant with the formulation
16 component constraint.
- 1 2. The method of claim 1 wherein processing the script comprises processing based on a
2 formulation knowledge web, the formulation knowledge web interrelating properties of
3 the formulation components to target properties.
- 1 3. The method of claim 2 wherein processing the script further comprises retrieving
2 formulation component properties from a database.

✓ K9

1 4. The method of claim 3 wherein the formulation component properties retrieved from the
2 database comprise a property of a formulation component comprising a raw material and a
3 property of a formulation component comprising a manufacturing process.

1 5. The method of claim 1 wherein processing the script further comprises excluding at least
2 one of the other sets of formulation components from the collection.

1 6. The method of claim 1 wherein the first formulation component comprises a formulation
2 component in the first set.

1 7. The method of claim 1 wherein the first formulation component comprises a formulation
2 component not in the first set.

1 8. The method of claim 1 wherein the range identified by the formulation constraint
2 comprises the permitted range and an impermissible range and determining the permitted
3 range comprises determining a range of values enabling formulation of the product in
4 accordance with the target constraint.

1 9. The method of claim 1 wherein:
2 the target constraint comprises a range of values comprising attainable values of the first
3 property and unattainable values of the first property, and processing the script
4 comprises determining the attainable values and the unattainable values.

150

1 10. A computer system for formulating a chemical product, the system comprising:

2 a processor coupled to a user input device;

3 a database coupled to the processor and comprising instructions to configure the

4 processor to:

5 receive a product formulation script, the script comprising:

6 a component selection option, the selection option comprising a

7 plurality of sets of formulation components,

8 a formulation component constraint identifying a range associated with

9 a formulation component property, and

10 a target constraint; and

11 process the product formulation script to determine a collection of formulation

12 components that can be used to produce a product, the product having a

13 first property in accordance with the target constraint, wherein the

14 collection comprises the first formulation component and the instructions

15 to process the script comprise instructions to:

16 determine a first one of the sets of formulation components for

17 inclusion in the collection; and

18 determine a permitted range associated with the first formulation

19 component in the collection, the permitted range being

20 compliant with the formulation component constraint.

151

ABSTRACT

A computer implemented method of formulating a product (e.g., a chemical product) includes receiving a product formulation script that guides the formulation of a product from a number of different components. The script can, e.g., set forth required and optional components and groups of related alternative components. To provide for such guidance, the script includes (i) a component selection option identifying sets of formulation components, (ii) at least one constraint to identify a numeric range associated with a property of one of the formulation components, and (iii) a target constraint. The product formulation script is processed to determine a collection of formulation components that can be used to produce the product such that one or more properties of the product meet associated target constraint(s). Processing of the script also includes selecting from among optional formulation components. This selection can be performed by determining sets of formulation components to be used in formulating the product and determining a permitted range associated with the formulation components. The permitted ranges enabling the formulated product to meet the target constraint(s).

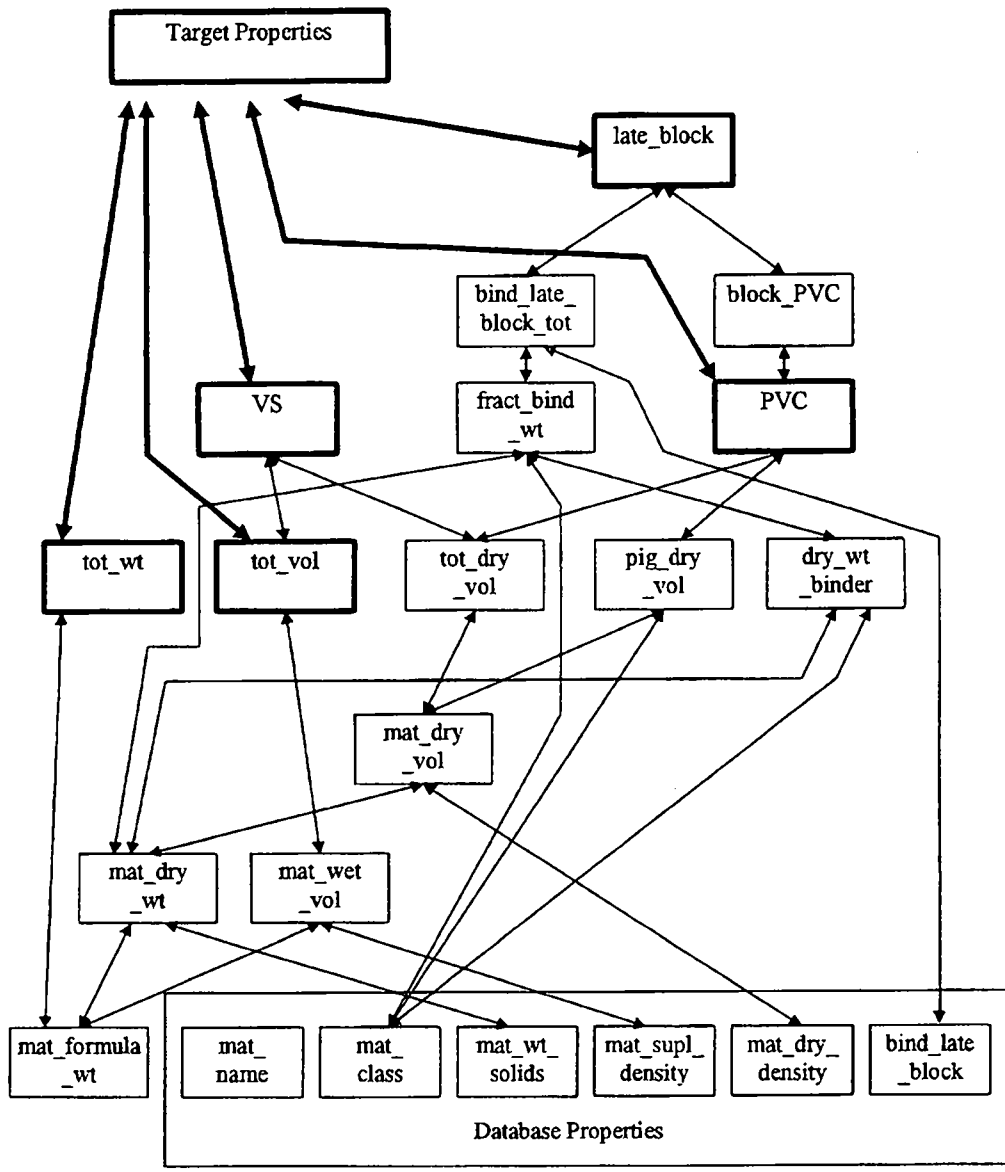


Fig. 1

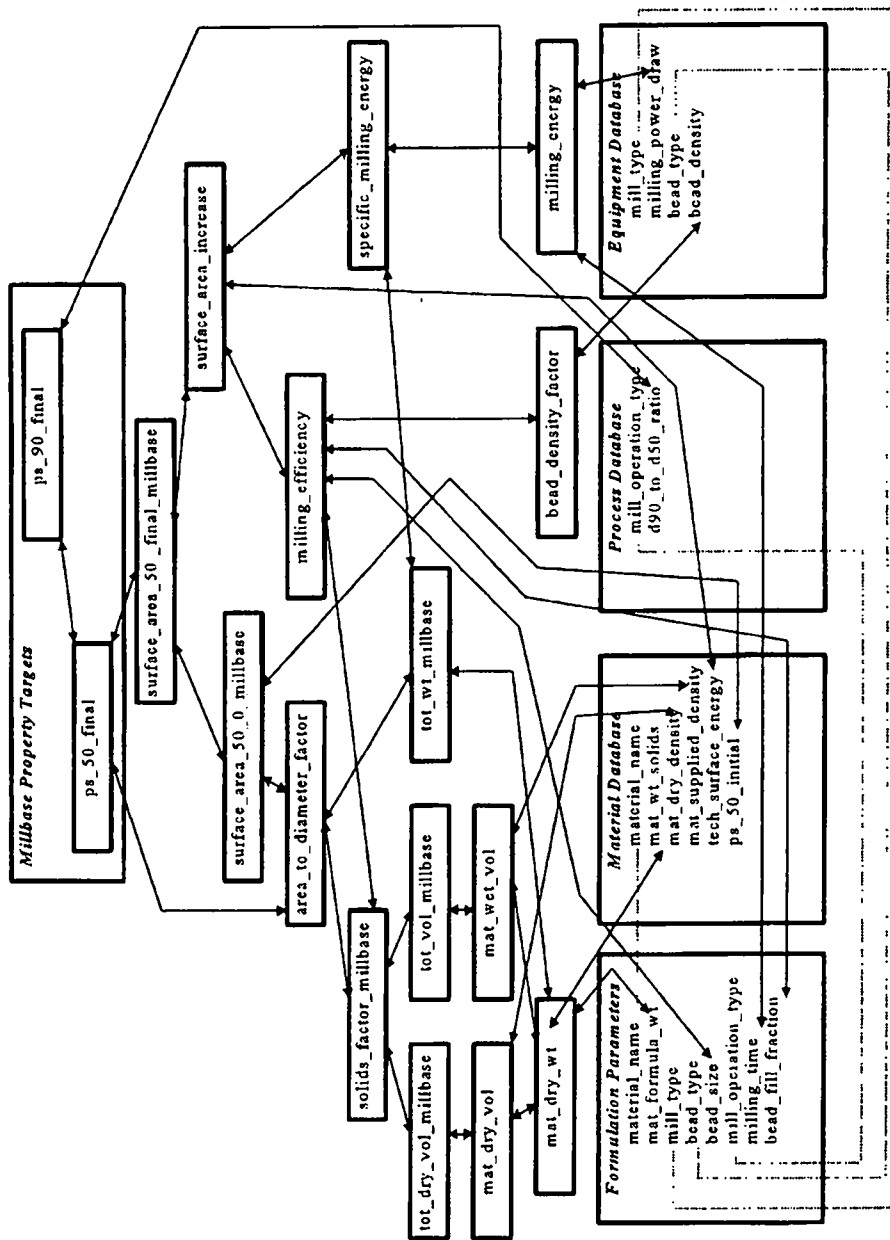


Fig. 2



Industria y Comercio

SUPERINTENDENCIA

154
Radicacion : 01041377 00000000
Fecha (AMP): 2001-05-23 16:56:06
Tramite : 002 PATENTES D 1 REGISTRO/ 411 PRESENTAC
Dependencia: 2020 DIVISION DE NUEVAS CREACIONES
Folios: 176
NIT : 800176089

RECIBO OFICIAL DE CAJA : 01 - 21,056
FECHA : ABRIL 2 DE 2001

***** CONSIGNACION *****

DEPOSITANTE	TIPO PAGO	BANCO	CUENTA	Nº. PAGO	FECHA PGO	Vr. PAGO
CAVELIER ABOGADOS	CONSIGNACION	BANCO POPULAR	050-00110-6	2749343	02/04/2001	17,100,960.00

***** CONCEPTO *****

CANT.	RENTISTICO	CONCEPTO	TOTAL CONCEPTO
1	50005-01-01 SOLICITUDES	1 TRAMITES DE SOL. DE PATENTE DE IN	356,640.00
		TOTAL :	\$ 356,640.00

SON: TRESCIENTOS CINCUENTA Y SEIS MIL SEISCIENTOS CUARENTA PESOS

RESPONSABLE : _____

RECIBO DE CAJA APLICADO AL EXPEDIENTE No. _____

Carrera 13 No. 27-00 Pisos 5, 7 y 10
Conmutador 382 0840
Fax 350 5220
E-mail: info@sic.gov.co
www.sic.gov.co
Bogotá, D.C., Colombia



Industria y Comercio

SUPERINTENDENCIA

NIT : 800176089-2

RECIBO OFICIAL DE CAJA : 01 - 16,212
FECHA : MARZO 12 DE 2001

SUPERINTENDENCIA Y COMERCIO
Radicacion : 01041377 00000000 Folios: 156
Fecha (AMD): 2001-05-23 16:56:06
Tramite : 002 PATENTES I REGISTRO/ 411 PRESENTAC
Dependencia: 2020 DIVISION DE NUEVAS CREACIONES

***** CONSIGNACION *****

DEPOSITANTE	TIPO PAGO	BANCO	CUENTA	No. PAGO	FECHA PGO	Vr. PAGO
CAVELIER ABOGADOS	CONSIGNACION	BANCO POPULAR	050-00110-6	2749335	12/03/2001	36,451,460.00

***** CONCEPTO *****

CANT. RENTISTICO	CONCEPTO	TOTAL CONCEPTO
1 50005-01-01 SOLICITUDES	82 INVOCACION DE UNA PRIORIDAD EN NU	100,000.00
	TOTAL :	\$ 100,000.00

SON: CIENTO MIL PESOS.

RESPONSABLE : _____

RECIBO DE CAJA APLICADO AL EXPEDIENTE No. _____

Carrera 13 No. 27-00 Pisos 5, 7 y 10
Conmutador: 382 0840
Fax: 350 5220
e-mail: info@sic.gov.co
www.sic.gov.co
Bogotá, D.C., Colombia



158
Industria y Comercio

SUPERINTENDENCIA

NIT : 800176089-2

SUPERINDUSTRIA Y COMERCIO

Radicacion : 01041377 00000000 Folios: 156

Fecha (ARD): 2001-05-23 16:56:06

Tramite : 002 PATENTES D 1 REGISTRO/ 411 PRESENTAC

Dependencia: 2020 DIVISION DE NUEVAS CREACIONES

RECIBO OFICIAL DE CAJA : 01 - 27,934
FECHA : MAYO 7 DE 2001

***** CONSIGNACION *****

DEPOSITANTE	TIPO PAGO	BANCO	CUENTA	No. PAGO	FECHA PGO	Vr. PAGO
CAVELIER ABOGADOS	CONSIGNACION	BANCO POPULAR	050-00110-6	2749333	07/05/2001	15,089,680.00

***** CONCEPTO *****

CANT.	RENTISTICO	CONCEPTO	TOTAL CONCEPTO
1	50005-01-01 SOLICITUDES	82 INVOCACION DE UNA PRIORIDAD EN NU	100,000.00
		TOTAL :	\$ 100,000.00

SON: CIEN MIL PESOS

RESPONSABLE : 

RECIBO DE CAJA APLICADO AL EXPEDIENTE No. _____

Carrera 13 No. 27-00 Pisos 5, 7 y 10
Conmutador 382 0840
Fax 350 5220
E-mail: info@sic.gov.co
www.sic.gov.co
Bogotá, D.C., Colombia



152

REQUISITOS MINIMOS PARA A Indicacion: 01041377 00000000 Folios: 156
Fecha (AMD): 2001-05-23 16:58:56
Tramite : 002 PATENTES D 1 REGISTRO/ 411 PRESENTAC
Dependencia: 2920 DIVISION DE NUEVAS CREACIONES

PATENTE DE INVENCION [✓]

MODELO DE UTILIDAD []

- Indicación de que se solicita la concesión de una patente [✓]
- Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud [✓]
- Descripción de la invención [✓]
- Dibujos de ser estos pertinentes [✓]
- Comprobante de Pago de las tasas establecidas [✓]

COMPLETA [✓]

INCOMPLETA []

DISEÑO INDUSTRIAL []

- Indicación de que se solicita el registro de Diseño Industrial. []
- Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud. []
- Representación gráfica y fotográfica del Diseño Industrial o muestra del material que incorpora el diseño. []
- Comprobante de pago de las tasas establecidas. []

COMPLETA []

INCOMPLETA []

ESQUEMA DE TRAZADO []

- Indicación de que se solicita el registro de un Esquema de trazado. []
- Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud. []
- Representación gráfica del esquema de trazado []
- Comprobante de pago de las tasas establecidas. []

COMPLETA []

INCOMPLETA []


Firma Responsable

Fecha: _____