

Использование банка фундаментальных знаний в области химической технологии "Орхидея" для прогнозирования развития технических систем на основе закономерностей их строения

Д.В. Бутенко

Волгоградский государственный технический университет, Волгоград

Аннотация: Активное использование современных компьютерных технологий позволяет эффективно решать задачи базовой проблематики общих законов строения и развития техники - установление и применение изоморфных закономерностей для технических объектов различной природы, которые, в свою очередь являются объективной основой для открытий, изобретений и совершенствования современной техники и технологий. На примере химической технологии показаны результаты применения авторской концептуальной технологии, которые открывают общие перспективы для технического творчества, - возможности получения патентоспособных результатов интеллектуальной деятельности с высокой степенью новизны и конкурентоспособностью.

Ключевые слова: банки фундаментальных знаний, техническое творчество, концептуальный анализ и синтез, закономерности развития, получение патентных решений, обеспечение новизны.

Закономерности строения, функционирования и развития технических систем являются фундаментом любого исследования и имеют первостепенное значение при проектировании новых технических систем. Разработка новых веществ и технических материалов строится не только на знаниях о существующих веществах и материалах и их особенностях применения, но в более широком плане – на закономерностях строения и развития техники в целом. Под закономерностями для технических систем (ТС), в концептуальном проектировании понимаются суждения, которые отражают всеобщую, существенную, устойчивую и воспроизводимую зависимость между множествами признаков и свойств элементов и составных частей ТС [1].

Разработка новых веществ и материалов, которые допустимо рассматривать как системы, происходит тремя возможными путями: 1 – параметрическая оптимизация количественных соотношений компонентов при неизменной структуре; 2 – создание нового технического решения при

выборе новой структуры; 3 – выбор нового принципа создания материала, нового принципа действия. При выполнении поисковых процедур на цикле 1–3 происходит рост критериев эффективности при росте затрат на НИР в соответствии с известной S-образной функцией [2], которая описывает тенденции развития не только отдельных типов веществ и материалов, но всего класса материалов одного функционального назначения.

Такая S-образная функция наглядно показывает стадийность в развитии: в то время как одни системы находятся на стадии проработки, другие – на стадии активного роста, третьи переходят в затухающий этап развития. Одновременное выполнение системами многих функций, ужесточение условий эксплуатации и увеличение разнообразия эксплуатационных воздействий приводят к сложности технических объектов [3]. Усложнение каждого класса систем происходит, прежде всего, за счет увеличения числа физико-химических эффектов, что невозможно отследить без использования современных возможностей вычислительной техники и использования банков фундаментальных знаний о веществах, материалах, протекания процессов их эксплуатации и способах их создания.

Наиболее изученным с количественной точки зрения процессом в развитии ТС является изменение ТС в пределах существующего принципа действия (ПД). Наиболее интересным представляется решение вопроса о том, какая должна быть система, приходящая на замену старой, т.е. решение задачи технической прогностики. Так, продвижение системы по кривой S-функции хорошо описывается установленными закономерностями развития ТС [4] и [5]. Анализ известных закономерностей развития показывает, что они могут быть описаны в терминах изменения параметров ТС на различных системных уровнях в сторону экстремальных значений. Можно сказать, что ТС в своем развитии передвигается по S-образной кривой и стремится пережить на ней экстремум.

Наиболее ярко требования достижения экстремума раскрывается в следующих известных закономерностях строения и развития систем:

- закон соответствия между функцией и структурой;
- закономерность оптимального соотношения параметров;
- закономерность минимизации компоновочных затрат;
- закон стадийного развития техники;
- закономерность функционального развертывания системы;
- закономерность повышения динамичности и управляемости системы;
- Закономерность дифференциации и специализации техники.

В связи с этим представляется актуальным рассмотрение вариантов проектируемой системы, когда один из её параметров или группа параметров (решающая фактор-группа) может быть искусственно установлен в экстремальное значение, в соответствии одной или несколькими закономерностям развития.

Работы по созданию автоматизированных систем банков фундаментальных знаний в различных областях науки велась в Волгоградском техническом университете с конца 1980х годов под общим руководством профессора Половинкина А.И. Использование банков фундаментальных знаний позволяет быстро смоделировать концепты развития систем и, таким образом, построить возможную линию развития выбранной ТС, особенно на уровнях функций и функциональных структур (ФС) и ПД.

Для рассмотрения вариантов ФС и ПД был использован, созданный Л.Н. Бутенко, Д.В. Бутенко в Волгоградском государственном техническом университете и зарегистрированный в "Роспатенте" за № 2017619642 от 30 августа 2017 г., банк данных химических реакций «ОРХИДЕЯ» построен таким образом, что дает возможность не только проводить многоаспектный

поиск химических реакций и получаемых веществ, но и через обращение к химическим функциям проводить построение цепей химических реакций на уровне функциональной структуры и конкретных химических взаимодействий.

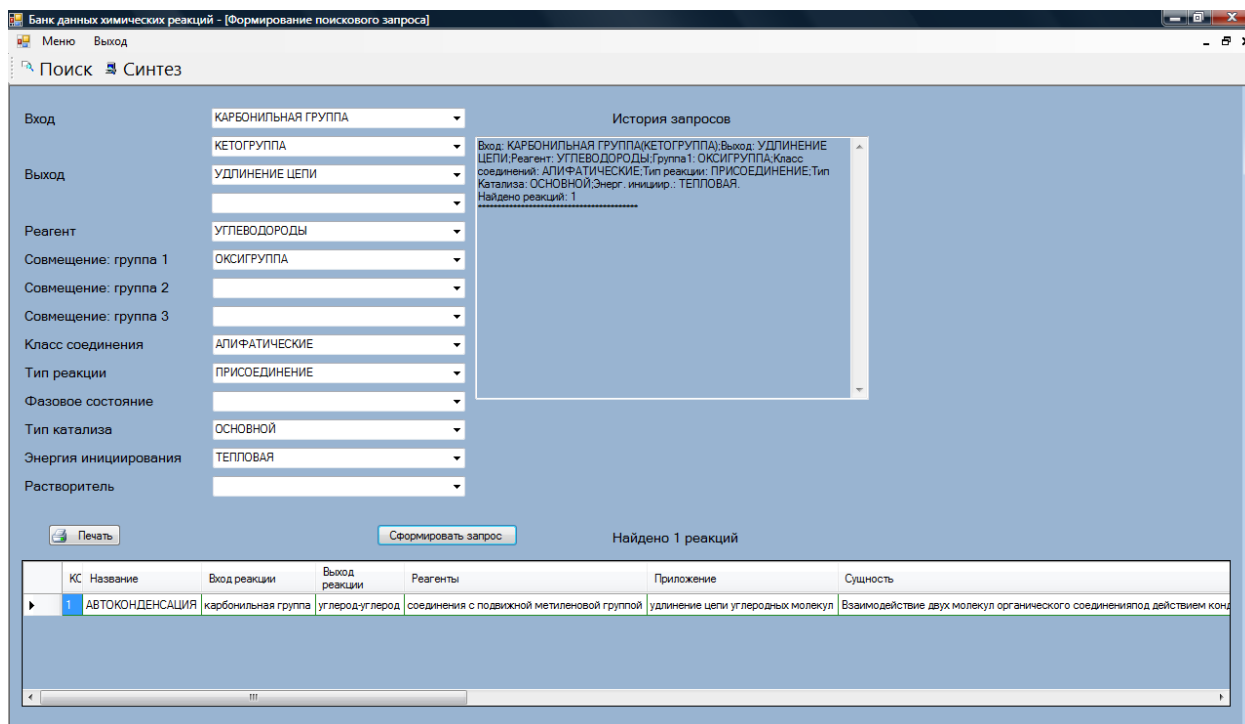


Рис.1. Формирование поискового запроса к банку химических реакций «Орхидея»

Программная система банка «ОРХИДЕЯ», позволяет получать информационные модели технологических процессов, используя автоматическое построение вариантов ФС в соответствии с закономерностями развития ТС. Это открывает возможность на информационном уровне управлять эффективностью синтеза химических веществ и предсказывать создание новых веществ и материалов и технологических процессов их получения.

В качестве примера использования банка фундаментальных знаний рассмотрим построение возможных маршрутов синтеза известного

лекарственного препарата для лечения гриппа на ранних стадиях заболевания – ремантадина.

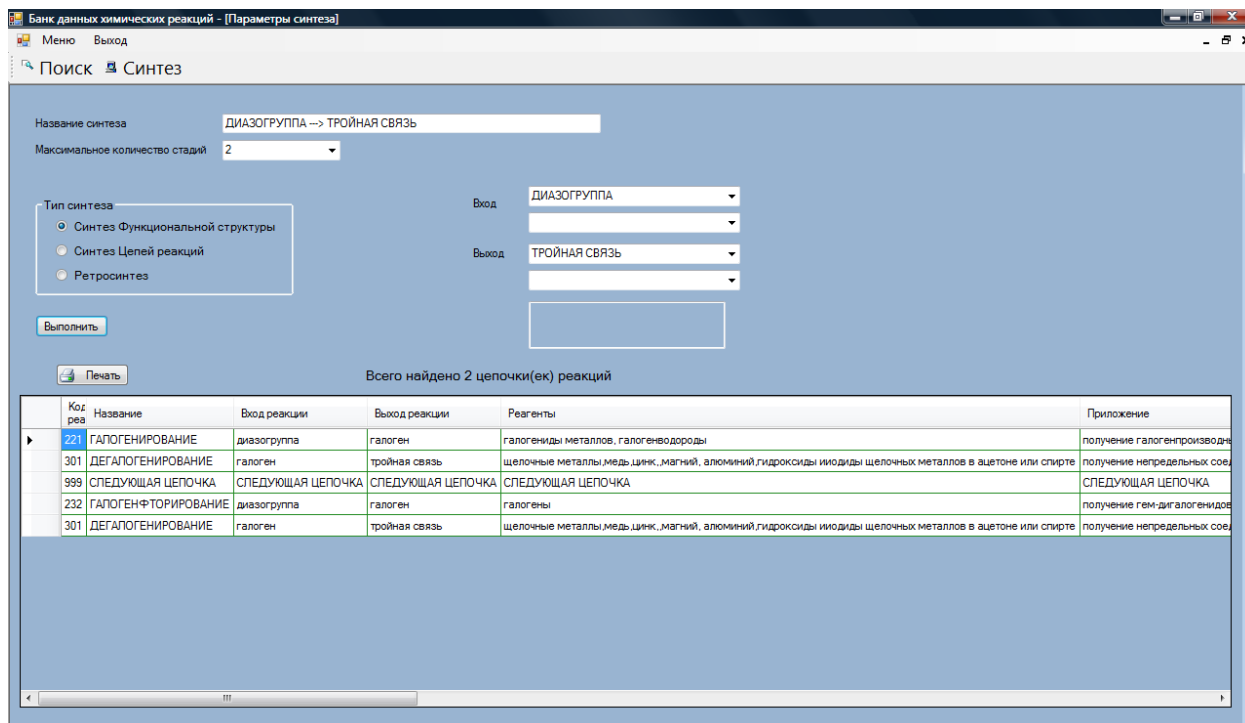


Рис.2. Возможность синтеза функциональных структур в банке «Орхидея»

Реализованный в современной промышленности способ [6] представляет собой цепь химических взаимодействий адамантана (Ad), описываемый следующей схемой:

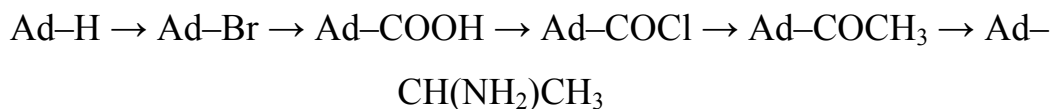


Схема показывает, что синтез финального вещества ремантадина включает в себя пять стадий с суммарным выходом на исходный адамантан в 32%.

При помощи банка «ОРХИДЕЯ» появляется возможность смоделировать следование некоторым тенденциям развития систем, как:

- закономерность минимизации компоновочных затрат;
- закономерность функционального развёртывания ТС.

На уровне ФС это будет соответствовать сокращению числа химических превращений в целевой цепи химических реакций.

Автоматический синтез ФС при помощи банка для целевого превращения «углерод-амин» показал, что возможны одно-, двух- и трех-стадийные синтезы выходного вещества.

С целью нахождения конкретных реакций получения ремантадина был сформулирован запрос к системе: имеются ли реакции получения аминов непосредственно из углеводородов, т.е. в качестве входного реакционного центра был выбран водород, выходом – аминная группа с условием одновременного удлинения цепи. По такому запросу была найдена одна реакция – аминоэтилирование, по ней существует аналог в виде результатов работы японских авторов, где взаимодействие производится с акрилонитрилом. С точки зрения существенного изменения химического принципа действия эта реакция заслуживает пристального изучения в аспекте проектирования нового технологического процесса, тем более что на примере аналогов показана её принципиальная осуществимость.

Следующим запросом к банку был поиск маршрута исключаящего стадию галогенпроизводного, так как получение его дорого и имеет большие технологические трудности и недостатки. По нему системой было найдено 12 комбинаций, где на стадии карбоксилирования, которая частично описана в литературе [6].

С точки зрения проектирования новых технологических процессов интересным является предложение системы использовать другие источники СО вместо применяемой муравьиной кислоты, а также использование винилиденхлорида для карбоксилирования, причем система учла, что получение винилиденхлорида удлиняет функциональную цепочку. Последующий анализ показал, что рассмотрение вопроса построения

найденной модели технологического процесса с такой точки зрения в литературе отсутствует.

Третьим запросом к банку был поиск маршрута, исключаящего стадию карбоксилирования с прямым введением кетогруппы с последующим аминированием. В данном случае системой банка были предложены не описанные в литературе для адамантана реакции галогенацилирования.

Описанные здесь запросы к банку фундаментальных знаний по химическим реакциям показывают, что сам химический процесс конструктивно может быть оформлен по-разному и это разнообразие в каждом конкретном случае может быть оценено экспертами с целью нахождения более эффективных цепочек химических превращений для получения новых патентных решений.

Таким образом, использование банков фундаментальных знаний для задач технической прогностики позволило определить общую закономерность, которая даёт осуществить возможность перехода к другим принципам действия, отвечающим закономерностям развития систем. Для химии это комплексные химические реакции, которые позволяют в одном технологическом акте совместить выполнение нескольких химических функций, что соответствует тенденции компактизации ФС, а в случае физических эффектов – образование комплексных физических эффектов (ФЭ), позволяющих сразу выполнять несколько технологических функций.

Исходя из вышеизложенного можно утверждать, что в новом технологическом укладе центральными когнитивными элементами, необходимыми для обеспечения высокого уровня новизны при исследовании и проектировании ТС, будут являться банки фундаментальных знаний с реализацией различных интеллектуальных функций, которые описаны в технологиях инженерного творчества. С их помощью качественный переход системы на другой ПД может быть смоделирован при изменении любого

параметра, описывающего ФС и ПД на противоположный [8,9], например, поиск ФЭ и химической реакции, позволяющий осуществить химический процесс не в жидкой, а в твердой или газообразной фазе. Однако при получении такой модели могут проявиться конфликты в структуре и функционировании системы [10], что приводит к неоднозначности толкования понятия «прогресс» в развитии ТС, тогда возникает задача экспертного оценивания найденного ПД по выбранным критериям эффективности.

Литература

1. Половинкин А.И. Законы строения и развития техники. - Волгоград, 1987. - 203с.
2. R.Foster Innovation. The Attacker's Advantage. Summit Books New York. by McKinsey & Co., Inc. 1986.- 197 p.
3. Каблов В.Ф. Оценка сложности технических объектов по информационным характеристикам // Применение законов развития и строения техники в поисковом конструировании/ Под ред. А.И. Половинкина. - Волгоград: ВолгПИ, 1987. - С. 62-85.
4. Половинкин А.И. Основы инженерного творчества. - М.: Машиностроение, 1988. - 368 С.
5. Балашов Е.П. Эволюционный синтез систем. - М.: Радио и связь, 1985 - 328 С.
6. Бутенко Л.Н., Дербишер В.Е., Хардин А.П. Синтез адамантанполимеркарбоновых кислот// Журнал «Органическая химия». - 1973.- №9.- С.779.
7. Бутенко Д.В., Привалов О.О., Бутенко Л.Н.Объектно-ориентированный банк технических функций и физических эффектов для проектирования химических технологий // Известия ВолгГТУ. Сер. Концептуальное

проектирование в образовании, технике и технологии: межвуз. сб. науч. ст. / ВолгГТУ. - Волгоград, 2006. - Вып.2, №2. - С. 89

8. Albegov E. V., Butenko Dmitry V., Butenko L. N., Kudrevatova O. V. The Cognitive Synthesis of a Novel Knowledge of the Harmony Phenomenon). // Canadian Forum. - 2016. Vol. 1, No. 1. pp. 21-25. URL: canadianresearchjournal.org/index.php/CF/article/view/28.

9. Бутенко Д.В. Использование инверсионного многомерного классифицирования в концептуальном проектировании // Инженерный вестник Дона, 2012, №3. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1022.

10. Бутенко Д.В. Свойство целостности при построении функциональных структур технических систем // Инженерный вестник Дона, 2013, №1. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1526.

References

1. Polovinkin A.I. Zakony stroeniya i razvitiya tekhniki [The laws of the formation and development of machinery]. Volgograd, 1987. 203p.
2. R.Foster Innovation. The Attacker's Advantage. Summit Books New York. by McKinsey & Co., Inc. 1986. 197 p.
3. Kablov V.F. Primenenie zakonov razvitiya i stroeniya tekhniki v poiskovom konstruirovanii. Pod red. A.I. Polovinkina. Volgograd: VolgPI, 1987. pp. 62-85.
4. Polovinkin A.I. Osnovy inzhenernogo tvorchestva [Fundamentals of engineering creativity]. M.: Mashinostroenie, 1988. 368 p.
5. Balashov E.P. Evolyucionnyj sintez sistem [Evolutionary synthesis of systems]. M.: Radio i svyaz', 1985. 328 p.
6. Butenko L.N., Derbisher V.E., Hardin A.P. Zhurnal «Organicheskaya himiya». 1973. №9. p.779.



7. Butenko D.V., Privalov O.O., Butenko L.N. Izvestiya VolgGTU. Ser. Konceptual'noe proektirovanie v obrazovanii, tekhnike i tekhnologii : mezhvuz. sb. nauch. st. VolgGTU. Volgograd, 2006. Vyp.2, №2. p. 89
8. Albegov E. V., Butenko Dmitry V., Butenko L. N., Kudrevatova O. V. The Cognitive Synthesis of a Novel Knowledge of the Harmony Phenomenon. Canadian Forum. 2016. Vol. 1, No. 1. pp. 21-25. URL: canadianresearchjournal.org/index.php/CF/article/view/28.
9. Butenko D. V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2012, № 3. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1022.
10. Butenko D. V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2013, № 1. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1526