

构建知识工程体系与化肥工业发展

孙先良

(上海化工研究院, 上海 200062)

摘要:介绍了我国知识工程的现状与发展状况,对构建知识工程体系与化肥工业发展进行了论述,提出科学整合“三废”知识资源,可以化废为宝,提高资源利用率,建议应构建化肥工业系列专用数据库群和专用知识库群;对数据库和知识库进行优化和优选;大力开展创新活动,提高资源和能源利用率。

关键词:知识工程;化肥;创新;数据库

中图分类号:TQ44

文献标识码:C

文章编号:0253-4320(2007)06-0001-04

Establishment of knowledge engineering system and development of fertilizer industry

SUN Xian-liang

(Shanghai Institute of Chemical Industry, Shanghai 200062, China)

Abstract: The current situation and development of knowledge engineering system in China is reviewed, and the establishment of knowledge engineering system and development of fertilizer industry is discussed. The establishment of special databases and special knowledge depot groups for the fertilizer industry is proposed. The integration of knowledge of industrial wastes can increase the utilization rate of resources. And the optimization and preferential selection of databases and knowledge depots, the promotion of innovation and raising of the utilization rate of resources and energy, are also discussed.

Key words: knowledge engineering; fertilizer; innovation; database

如何以最经济、最无污染、最安全和最快速度的技术手段生产各种各样的产品,以解决当今现实问题,这不仅需要科学的新发现,更加需要一种“知识工程”的技术手段,将解决问题的方法和方案以浩瀚的人类知识库中挖掘、总结和整理出来。这对于当今国家经济发展,利用人类已经发明和发现的知识来提高国民经济效益,提高资源和能源利用率,解决环境污染具有重大的现实意义。

知识工程不仅是一种科学技术方法,而且是科学技术和国民经济发展的具有重大战略意义的举措和新思路。与传统思维不同的知识工程,不仅追究知识的第一发现,而且更注重对知识的占有率和利用率,关注如何把知识转化为技术力量,开发广泛的创新活动,为解决当今现实问题做出贡献。

1 我国知识工程现状与发展

我国知识工程在战略上具有紧迫性,发达国家和周边国家都在悄悄地抢占这一制高点。当今,科技创新和新产品开发已离不开数据库群、专利数据库群和知识库群。不少科研单位依赖的大型数据库、专利库大多购自国外,不仅消耗大量外汇,更重

要的是我国的科技和经济发展将受制于人。为此,我国高等院校、科研院所已经开展了数据库群、知识库群以及知识工程的开发研究,并已不断取得新的进展和良好效果。

功能分子信息经过 200 多年积累,特别是 20 世纪后期合成化学的大发展,已经收集了大量化合物的信息(全球大约有 20 003 种化合物),包括化合物的合成、结构、性质、用途等。现在正以越来越快的速度合成出新的化合物。我们越来越需要合成一结构—性质—功能—用途的数据库。当今,采用知识工程、知识发现和数据挖掘可以快速挖掘出相关功能的化合物和解决问题的基本数据和方案。

与化学反应和化学过程相衔接的化学信息学,近年来开始受到人们的广泛重视。化学反应以及化学过程的热力学和动力学信息库,包含的范围很广。除去基本化学反应以外,还包括诸如在土壤、大气、水体、生物体内的反应资料和数据库。例如,环境物(施入的化肥等物质)及其反应的信息库是研究物质在环境中的来源、去向、停留时间的基本数据库。又如,土壤营养数据库、植物营养数据库、科学施肥专家知识库、人体营养数据库等,化工过程的计算机模

拟和仿真等都需要建立相应的数据库群和知识库群。

北京科技大学信息工程学院知识研究所所长杨炳儒教授在国家自然科学基金项目“基于数据库与知识库的知识发现及其农业应用系统的研究”(项目编号:69835001)资助下,从 1999 年 1 月至 2000 年 12 月,经过努力开发出面向科学施肥的农业知识发现系统(KDIST-SF),将 KDTICM 与 ICCKDSS 成功应用于科学施肥之中。

在 ICCRDSS 的基础上,他们开发出面向科学施肥的农业知识发现系统 KDIST-SF,开发环境是 KDIST/V1.0,用户只需要提供自己的数据库和知识库:①基本数据库是土壤肥力参数的样本知识库;②基本知识库是科学施肥专家系统的样本知识库。由 KDD* 和 KDK* 构造相应的知识发现工具箱,就可进行土壤肥力评估、施肥量确定、目标产量确定等方面的知识发现和精化。

通过使用 ICCKDSS 对安徽省合肥市相关的农业数据进行挖掘发现,水稻干物质累积和对硒(Se)的累积不同步。前者高峰在生长中期,后者以生长后期为主。另外,水稻对 Se 有一定的生物富集作用,将这些规则存于知识库后,根据这些规则,在农业措施上应在水稻灌浆充实前增施一次硒肥。而在缺 Se 和低 Se 地区施用 Se 肥能显著提高水稻含 Se 量,改善其营养品质,提高其市场竞争力。

这些数据库可指导人们合理科学施肥,另外也可指导肥料生产厂家在不同阶段添加不同微量元素,以适应农业生产需要。实际运用证明,安徽省合肥市油菜施肥专家系统的知识库经过知识发现,得到了进一步完善和精细化。

近年来,中国科学院合肥智能机械研究所开发成功利用计算机程序来实现配方专用肥中的外部数据处理技术。该技术是将欲执行的原始数据库、基本知识库载入计算机存储器中,通过协调器进行数据预处理,选择分级数据库、数据表和属性。将入选的数据装入内存进行处理,得到一个新的配方专用肥数据,再对该数据进行挖掘处理并检测,得到配方专用肥数据和科学施肥评价。用户只需提供农业生产过程中记录的数据,就可以进行诸如土壤肥力评估、配方专用肥施肥量的确定、目标产量确定等方面的数据处理。该方法易学易用,操作简单,可用来指导专用肥配方和施肥量的确定,为测土施肥技术的推广应用提供了一种科学方法。

2 构建知识工程体系与化肥工业发展

知识工程的建立和构建需要企业和行业的知识与数据的积累和整合。然后通过知识发现和数据挖掘展开研究寻找科学技术的规律和优化,从而为解决国民经济发展中重大现实问题提供解决方案和决策,同时可大大提高资源和能源利用率。

2.1 开发富锌、富铁专用肥,满足作物生长需求

据 WHO 资料显示,全球缺铁、铁锌营养元素是人类最普遍的微量元素缺乏症。目前全世界约有 30 亿人口不同程度地缺少微量元素,其中 21.5 亿人缺铁,占世界人口 40%。据统计,我国居民平均贫血者为 20.1%,其中婴幼儿、老年人贫血者比例较高,分别为 31.1%、29.1%,育龄妇女贫血者为 19.9%,缺锌者为 30%~60%,儿童缺锌较为严重。农业专家已发现,高铁含量的稻米为富铁作物资源。对稻米研究表明,选配富铁、富锌的杂交稻组合是非常可能的。因此,化肥企业可以开发富铁、富锌专用肥以满足农作物的需求,同时,也有利于人类健康的发展。

另据英国科学家研究发现,含硫磺土壤种植的小麦中某些氨基酸含量少,能使最终烧烤的面包致癌物——丙烯酰胺含量减少。英国雷丁大学(University of Reading)科学家研究发现,在硫磺不足的土壤中小麦中天门冬素(一种氨基酸)含量较高,正是由于这种氨基酸加上糖分会使面包等在烘烤中形成致癌物——丙烯酰胺。研究还发现,确保土壤中有足够的硫磺可使农作物的天门冬素含量降低,从而在一定程度上降低食品中丙烯酰胺的含量。因此,运用这些知识和原理,将化肥企业生产的含硫尿素可用作小麦的专用肥,不仅可提高小麦品质,而且有利于人类防癌。

2.2 针对作物需求,开发多功能新型肥料

2.2.1 具有保水抗旱肥效的多功能新型肥料

干旱缺水是制约我国干旱、半干旱地区经济可持续发展的主要因素,保水剂的应用是一项新型化学抗旱节水技术。中国矿业大学和广东三九生物降解塑料公司根据保水剂的作用原理及理论知识体系,包括保水剂自身吸水、保水和释水特性原理,保水剂改良土壤原理,保水剂改变植物水分关系,调控植物自身生理节水知识原理等,选取资源丰富的含腐殖酸 60%左右的风化煤,提出风化煤中腐殖酸的分离、提纯与改性技术,以腐殖酸为基本原料,采用接枝共聚和表面交联方法研制出腐殖酸保水剂,保

水剂在纯水和生理盐水中吸收水分得率分别达到300~800倍和120倍,饱和吸水时间为20~40 min,耐盐性能优于国内同行标准,腐殖酸保水剂中腐殖酸含量可从5%~60%调整,根据需要可制得不同吸水性能的腐殖酸保水剂产品。保水剂与化肥组合成保水肥效多功能新型肥料。

通过对小麦、玉米和沙棘试验证明,它具有明显的抗旱、促生长和提高水分利用率效应,在甘肃、宁夏等地区,推广应用32.61万亩种植玉米、马铃薯、蔬菜等,共增产18 770 t,直接经济效益1 581.5万元,其中示范农田粮食作物亩产300 kg,较大田增产15%,马铃薯增产35%以上,直径大于10 cm的商品马铃薯增产40%以上。

2.2.2 具有农药肥效的双功能新型肥料

日本Fumakilla公司将具有杀虫和肥效双功能的物质组合起来,开发出具有杀虫肥料的棉花杀虫新型肥料。每棵棉花只需放置2片,即可同时发挥预防和杀灭蚜虫及施肥的双重效果。该产品杀虫肥料效果持久、缓和、片剂使用方便、可靠。该产品可在2~3个月内缓慢溶解、药效持久。片剂中的杀虫成分缓慢向外渗透扩散,被植物根部吸收,在1~2天内即可扩散到植物全株,并立即消灭蚜虫。

山东省开发出防治小麦病害的综合新型肥料,它由10%碱式碳酸铜,76%普钙,2% $ZnSO_4$, 9%钙镁磷肥,2% $CuSO_4$ 和1%水混合配制而成,其中碱式碳酸铜组分为: $CuSO_4$ 22%,生石灰67%,NaOH 4%,水7%。它既是一种防治小麦全蚀病和枯病的农药,又是一种含P、Ca、Mg、Ca的多元素多功能新型肥料。

2.3 运用多学科、跨行业的知识工程保护生态环境,大力开发环保型新型肥料

我国是世界上土地沙漠化危害最严重的国家之一,全国现有沙漠和沙化土地已达174万 km^2 ,而且每年以3 436 km^2 的速度继续扩展。为了遏制沙漠化的趋势,太原理工大学化学化工学院运用多学科、跨行业的知识工程理论,与有关单位协作,开发出环保型造纸废液固沙保土有机肥,具有重大的现实意义。

据试验,每喷播治理1 m^2 沙漠或沙化土地需这种固沙肥粉新型肥料0.2 kg,每亩只需133.4 kg,每平方公里需要200 t。另据镁铵蒸煮制浆工艺实验,每生产1 t纸浆可同时利用废液副产1 t环保型固沙保土有机肥。以年产10万t的造纸企业副产的固沙保土有机肥就可治理500 km^2 沙漠化土地,那么7

个年产10万t的造纸企业就可以遏制全国每年扩展新增的3 436 km^2 沙化土地。如果在全国造纸企业中推广该项技术,每年可治理203万 km^2 沙漠。坚持10年,即可将全国沙漠和沙化土地全部治理完毕。同时,还可解决全国造纸企业的废液污染问题。

从经济效益来说,利用环保型造纸废液副产固沙有机肥治沙,连同运费和喷播施工费用,每亩平均不到300元,相当于0.45元/ m^2 ,大大低于国家“863”计划招标课题要求的固沙材料成本(0.8元/ m^2)。以年产10万t环保型固沙保土有机肥可获8 000万元经济效益计算,加上每年节约废液治理费用3 000万元,每年可新增利税1.1亿元,从而实现环境效益、社会效益、经济效益的协同发展。

美国一家农场成功利用化学反应原理知识,采用硫酸铵改良了高钠土壤。以往,这个面积为607 hm^2 的农场土地含钠量高达13.7%,一直无法生长水稻。经过 $(NH_4)_2SO_4$ 处理后,不仅稻株长势良好,而且单位面积产量也大大增加。其增产原理是:首先硫酸铵中的硫降低了土壤中的钠含量,硫酸根离子与钠离子结合生成 Na_2SO_4 ,可随水流走,从而降低了土壤的pH,为水稻生长创造了较好的生态环境。同时,提高了磷和微量元素Fe、Mo、Zn的利用率。

中国科学院合肥物质科学研究院将天然矿物质和生物材料具有控释物质的知识原理运用到化肥控释技术中,在低成本生产控释肥技术中取得了突破性进展。经专家鉴定,该技术的创新之处是研制出一种环境友好、成本低、无溶剂的新型氮肥缓控释材料,以达到氮肥控释的目的。该控释材料不仅具有很好的控释氮肥的效果,而且具有绿色环保、自然降解,长期施用可改善土壤理化性状,提高土壤保肥和保水能力的特点。通过田间试验表明,在一次性施作基肥时,尿素中氮素利用率提高19.4%,碳铵利用率提高26.9%,稻谷产量提高10%;而施肥成本比原来降低5%。同时,不需追肥,一次性施肥,可大大降低施肥劳动成本。

3 科学整合“三废”知识资源,提高资源利用率

3.1 整合现有磷石膏利用知识资源

磷石膏是硫酸法萃取磷酸的副产品,每生产1 t磷酸铵就会产生4.5~5.5 t磷石膏。目前,国内已堆积有1亿t磷石膏,且每年新增2 000多万t磷石膏,严重污染环境,一直是我国乃至世界上亟待解决的重大课题。

山东鲁北化工公司采用磷铵副产物磷石膏制硫酸联产水泥新技术。将磷铵、硫酸、水泥 3 套生产装置有机地组合为一体化,形成绿色环保产业链。利用生产磷铵排放废渣磷石膏制硫酸,联产水泥;硫酸返回用于生产磷铵;硫酸尾气制取液体 SO_2 , 作为海水提溴原料;废水封闭循环利用,磷铵干燥采用节能型沸腾式热风炉,以锅炉排出的煤渣为原料,燃尽后成为合格的水泥混合原料,整个过程废渣全部加以利用,可以化废为宝,硫在装置中实现了循环利用。

这一产业链与相同规模厂家单独生产磷铵,采用硫铁矿生产的硫酸和一般水泥厂相比,成本最低,硫酸成本为硫铁矿制酸的 1/2,水泥成本为一般水泥厂的 2/3,磷铵成本每吨降低 700 元。如在全国推广此项技术,每年不仅可节省磷石膏堆场建设费用 6 000 万元,而且还可为国家节省因生产 800 万 t 水泥的石灰石所需的 24 亿元开采费用,节省生产 600 万 t 硫酸所用的 30 亿元硫铁矿开采费用,可大大提高资源利用率,又改善了生态环境。此外,磷石膏还可用于生产建筑材料、治理沙漠化的固沙剂、改良土壤剂等,其前景十分广阔。

3.2 构建以化学矿加工为核心的生态工业知识系统,为黄磷“三废”利用开辟新途径

化学工业在回收和利用 CO_2 资源方面取得了很大成效,大多数将 CO_2 制成尿素和碳铵化肥,不仅可为农业发展提供大量化肥,而且为降低温室气体排放做出了贡献。有些企业还将 CO_2 进一步精制成食品级 CO_2 供饮料、食品工业使用。

据报道,2010 年化肥行业还需减排 CO_2 1 377 万 ~ 1 413 万 t,因此化肥企业还须继续努力,进一步做好 CO_2 回收利用工作。随着以煤、石油、天然气为原料的化工发展,还会产生大量 CO_2 气体,现在每年以 4% 速率递增。采用现有知识工程,可将 CO_2 进一步合成甲醇、甲烷、烃类、二甲醚、碳酸二甲酯、 CO_2 催化共聚制成塑料以及一系列 C_1 化工产品,并不断取得新进展。

据美国能源部称,通过向进入枯竭的油田注入 CO_2 这一新技术,可使美国石油储量提高 4 倍。为进入枯竭期的油田注入 CO_2 气体,可迫使地层深层的石油上浮。美国在过去 30 年中针对此项技术进行了小规模尝试并取得成功。美国目前探明的石油储量为 219 亿桶,利用该项技术可使其石油储量增加 890 亿桶。按美国目前消费水平,新增加的石油储量可使美国使用 12 年。如进一步加以改进,还可

使油田利用率提高 1 倍。

据报道, CO_2 与环氧化物偶联反应合成环状碳酯,这一重要中间体将是 CO_2 资源利用的重要途径之一,它可用作电池电解液、极性溶剂和重要的化工中间体。

4 采用 F-T 反应知识工程将合成氨净化双甲工艺升级为醇烃化新工艺

湖南安淳高新技术公司在合成氨工艺中不断进行知识创新,已经将原来铜洗工序革新成生产甲醇和甲烷化,即双甲工艺,使合成氨工艺不仅联产甲醇,而且可大大简化净化工艺。近年来,该公司又采用 F-T 反应知识工程将甲烷化部分革新为烃化反应,即为醇烃化工艺,除生产甲醇外,还可生产我国能源紧缺的汽油替代品。不仅可为汽车工业提供车用燃料,还可提高甲醇的产量,为合成氨工业提高资源利用率又闯出了一条新途径。

该醇烃化新工艺具有以下特点:①醇烃化工艺比双甲工艺可减少原料气中 H_2 耗量 24%,可减少放空气量 80%;②醇烃化工艺生产的液态产品是醇类和少量烃类物质,可与粗甲醇一起进行甲醇精馏,回收其中甲醇以进一步提高甲醇产量;③醇烃化工艺可省去甲醇化后的净醇工艺;④醇烃化精制有利于反应热平衡和反应转化率提高;⑤醇烃化工艺由于不采用甲烷化含镍催化剂,不会产生有毒物质,因此安全环保;⑥醇烃化工艺可获得汽油替代品,为汽车工业提供车用燃料。目前已有 29 家化肥企业推广应用该技术,其前景十分看好。

5 建议

5.1 大力开展知识工程,构建化肥工业系列专用数据库群和专用知识库群

我国化肥工业已有几十年的生产和研究历史,在生产和研究中积累了大量各类生产数据、经验和知识,同时也积累了世界化肥行业的各类数据和知识。为此,应当建立起化肥工业系列专用数据库群和知识库群。如各种煤气化方法和煤气化反应数据库,脱硫数据库、脱碳数据库、 CO 变换数据库、 CO_2 回收利用数据库、甲醇数据库、二甲醚数据库、氨合成数据库、各类催化剂数据库、各类化肥设备数据库、化肥工业节能数据库、“三废”回收和利用数据库和知识库、磷肥和复肥数据库、专用肥数据库、中量和微量元素肥料数据库、科学施肥数据库和专家系统

(下转第 6 页)

无溶剂体系早已成为这类精细化学品发展的方向。在美国“总统绿色化学挑战奖”中有 8 项涉及该方面的研究成果。

(4) 精细化学品多数为终端产品, 使用后要排放到环境中, 有些产品的使用还与人们的生活息息相关。一些传统的精细化学品, 在使用过程中或使用后排放到环境中直接造成了环境污染或其他危害, 或因长期残留在环境中给生态环境造成了巨大影响。例如, 有机氯杀虫剂是人类最早使用的合成农药, 曾在防止害虫方面发挥了巨大作用, 但它们在起作用时, 会在许多种类的动、植物中生物聚集, 而影响鸟类等动物的生存, 且经常聚集在动物脂肪组织或脂肪细胞中, 当被人食用时, 也就造成对人的危害。DDT 就是第一个显示出大范围危害的此类农药。因此, 设计安全和可降解的精细化学品一直受到世界各国的重视。在美国“总统绿色化学挑战奖”中有 20 项涉及该方面的研究成果, 其中绿色化学品奖 8 项, 小企业奖 6 项, 绿色反应条件奖 4 项, 绿色合成路线奖和学术奖各 1 项。

2 绿色精细化工的发展趋势

对获奖项目的分析还表明, 生物技术、原子经济性反应、新型催化剂、无溶剂体系或绿色溶剂、膜技术、耦合技术将成为绿色精细化工的关键技术。采用可再生原料也是实现精细化工可持续发展的关键。

2.1 采用生物技术

生物催化反应大多条件温和, 设备简单, 选择性

好, 副反应少, 产品性质优良, 安全性好, 不产生新的污染, 因此受到生物学家和化学家的高度重视。目前, 许多精细化学品的合成和使用对生态环境产生了严重污染。生物技术给精细化工的绿色化带来了希望, 使许多原来用化学方法很难实现的合成过程得以顺利完成。例如, 近些年投放市场的人工胰岛素、干扰素等都是典型的利用生物技术生产精细化学品的例子。目前世界各国的精细化工企业都将大量资金和人力投入到生物工程技术的研究和开发方面。可以预见, 21 世纪将是生物技术大放异彩的时代。在合成一些具有复杂结构的有机精细化学品, 特别是具有光学活性的不对称化合物方面, 生物技术具有显著的优势。在发展生物质化工原料和开发绿色精细化学品等方面, 生物技术也将发挥不可替代的作用。正因如此, 在 57 项获奖项目中有 16 项涉及生物技术, 其中用于药物合成的有 4 项, 涉及生物精细化学品的有 6 项。

Lilly 研究室开发了一种采用生物催化剂合成药物(如抗痉挛药物 LY300164)的新方法(1999 年绿色合成路线奖)。采用该技术每生产 1 kg LY300164 可减少约 41 L 的溶剂和 3 kg 的含镉废水。该技术也改善了生产的安全性, 并使产品的产率从 16% 提高到 55%。Scripps 研究所的 Wong 教授开发了一些用于合成用其他方法难以合成的药物和其他重要化学品的高效酶催化方法(2000 年学术奖)。所有的这些酶催化反应都在环境友好的溶剂中进行, 反应条件温和, 几乎不需要对官能团进行保护。Bristol-Myers

(上接第 4 页)

知识库、土壤营养数据库、植物营养数据库以及相关的知识库群, 为大力开发知识工程打下坚实的基础。

5.2 采用知识发现, 数据挖掘技术对数据库和知识库进行优化和优选

针对需要解决的问题, 采用数据挖掘技术进行优化, 进一步提高资源和能源利用率, 节能降耗。

5.3 化肥企业要与高等院校、科研单位合作, 大力开展知识工程

只有化肥企业与高校研究单位合作, 才能加快数据库和知识库的建设和利用。不仅要科学合理整合知识资源, 而且要将无形知识资源更好地转化为有形的经济效益和实力。

5.4 大力推广应用《发明问题解决理论》, 开展创新活动

1946 年前苏联发明家根里奇·阿奇舒勒通过与

合作者协作对 250 万件专利进行了深入的研究, 发明了一套“发明问题解决理论”。在世界各国尤其是一些发达国家引起了高度重视, 纷纷推广应用, 取得了显著的效果。全球已有 200 多万件专利应用了该理论的原理和规则。美国波音公司采用该理论, 解决了波音 767 飞机改成空中加油的关键技术问题, 为该公司赢得了 16 亿美元的订单。美国福特公司采用该理论后, 每年创造经济效益达 1 亿美元以上。近年来, 俄罗斯、日本、印度、韩国等一些国家也都在大力推广应用该理论。韩国三星公司于 2003 年采用该理论指导项目研发, 节约成本 15 亿美元, 它已成为在中国申请专利最多的国外企业。因此建议化肥企业应大力推广应用《发明问题解决理论》, 开展全方位创新活动, 为化肥节能降耗, 提高资源和能源利用率及“三废”综合利用, 开发新产品做出贡献。■