

专家系统在材料领域中的研究现状与展望

白润 郭启雯

(北京理工大学材料科学与工程学院,北京 100081)

文摘 简要介绍了专家系统的一般结构及功能,综述了近年来专家系统在材料领域中的应用,即在材料优化设计、材料智能加工与智能控制、材料缺陷诊断与质量控制等方面国内外研究现状与取得的成果,探讨了今后的发展方向。

关键词 专家系统,材料设计,智能加工,性能检测

Current Status and Outlook of Expert System in Material Science

Bai Run Guo Qiwen

(School of Material Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081)

Abstract The structure and functions of a basic expert system are briefly introduced. Application and development of expert systems in material science at home and abroad in recent years are reviewed systematically including material design and optimization, intelligent processing and controlling of materials, fault detection and quality control. Future development is discussed as well.

Key words Expert system, Material design, Intelligent process, Detect property

1 引言

专家系统又称基于知识的系统,是人工智能走向实用化研究中最引人注目的一个领域,其实质是一个以知识为基础的计算机程序系统,其内部含有大量的某个领域专家水平的知识与经验,能够模仿人类专家思维和求解该领域问题。实践表明,只要经验知识和数据表述合理、准确,并且达到一定的数量,通过严密的计算机程序,由专家系统代替人类专家进行推理,其结果的准确性和有效性并不逊于人类专家;在某些数据量巨大、复杂程度较高、而模糊程度较低的问题的处理上,专家系统甚至超过了人类专家。它的高性能和实用性引起了全球科技领域的广泛重视。近年来,专家系统走出实验室,开始在各行各业中得到应用,在材料科学领域中的应用也受到关注。

2 专家系统构成及各模块功能

收稿日期:2004-03-22

白润,1978年生,硕士研究生,主要从事战斗机部材料专家系统的研究工作

一般专家系统由知识库、推理机、数据库、知识获取机制、解释机制以及人机界面组成,其相互间的关系如图1所示。

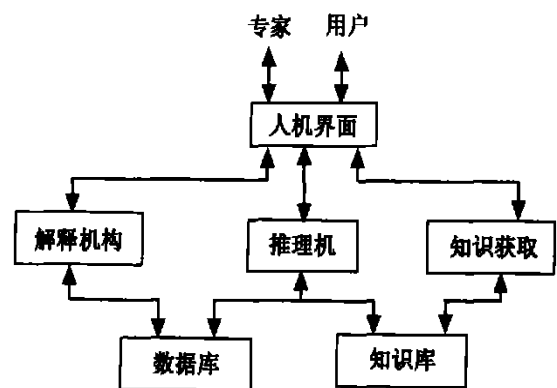


图1 专家系统的一般结构

Fig. 1 Structure of a basic expert system

知识库用以存放专家提供的专业知识,包括计算模型、表达式、判据、经验知识等;数据库是用于存放推理的初始证据、中间结果以及最终结果等的工作存储器;推理机用来协调控制整个系统以决定如何使用知识库中的知识与规则推导出新的知识,它是构成专家系统的核心部分;通过知识获取机制可以扩充和修改知识库,实现专家系统的自我学习;解释机制通过对推理过程的回溯能够根据用户的提问,对结论、求解过程以及系统当前的求解状态提供说明;人机界面实现用户与系统之间的交互。专家系统的性能在很大程度上取决于知识库中的知识对解决相应领域的问题是否合适和完备。

3 材料领域应用的专家系统

随着材料科学研究水平的不断提高,已经呈现出由实验科学向计算科学发展的趋势。由于材料研究及其制备加工过程的影响因素非常复杂且具有很大的不确定性,其研究方法更多地依赖于专家经验。专家系统等人工智能方法对于处理这种具有强非线性关系的研究越来越多地引起材料科研人员的重视,并随着应用范围的不断拓展开始发挥重要作用。

目前应用于材料领域的专家系统主要集中在材料优化设计、材料智能加工与智能控制、材料缺陷诊断与质量控制等方面。

3.1 材料优化设计专家系统

材料优化设计专家系统是指具有相当数量的与材料有关的各种背景知识,并能应用这些知识解决材料设计中有关问题的计算机程序系统^[1]。材料优化设计专家系统的工作流程是:根据使用要求,提出材料性能指标,先对数据库进行查询,如查询成功,进而应用优化系统,选择出最符合要求的材料,实际上,这是一个优选材料的过程;如查询不成功,则利用知识库中的有关信息(材料性能、组织与工艺的关系),通过推理给出达到设计要求的材料成分及工艺建议,再根据建议进行实验验证。这类专家系统通常也可用来预测新材料的性能。

根据建立专家系统的基础不同,材料设计专家系统又可分为以下几类^[1]:以知识检索、简单计算和推理为基础的专家系统;以计算机模拟和运算为基础的专家系统;以模式识别和人工神经网络为基础的专家系统。

宇航材料工艺 2004年 第4期

3.1.1 以知识检索、简单计算和推理为基础的专家系统

1985年日本的三岛良绩和岩田修一^[1]建立了利用大型知识库和数据库辅助材料设计的合金设计系统,为未来的可控热核反应炉设计和选择材料。他们在大型计算机内存入了各种与合金设计有关的信息,其中包括各种元素的基本物理化学数据、合金相图、合金物性的各种经验方程式、各种合金的性能和用途等,构筑了以70多种元素的含量为坐标的多维空间,将上述各种信息记录在该多维空间中,然后输入对材料性能的要求,最终得到所需材料。日本国家无机材料研究院^[2]还开发了陶瓷材料设计专家系统。他们利用元素的晶体化学数据库和化合物的热力学数据库,并将氮化硅的烧结参数、微观结构和强度之间的关系建成知识库,采用人工智能软件进行推理,从众多的氧化物中选出合适的烧结助剂,计算出陶瓷材料在室温和高温下的强度值。

为了进行高温结构陶瓷的材料设计,清华大学赖树刚^[3]等人先后建成了陶瓷材料数据库和二氧化锆知识库。此数据库包括 ZrO_2 、 Si_3N_4 和 SiC 等高温结构陶瓷材料,收集了国内外有关实验数据4000组。利用此系统可由所需性能出发,查出满足性能要求的材料,给出其组分与工艺。二氧化锆知识库主要收集和整理了有关 ZrO_2 组分、工艺与性能之间的关系,可以用来预测材料的性能和进行材料的工艺设计。清华大学曹茂盛等人^[4]对“压电复合材料设计专家系统”进行了研究,并完成了原型设计。此系统将专业领域知识根据设计过程的不同阶段分别存放在三个知识库中,另外还建立了两个元知识库,在推理过程中,其中一个元知识库可根据数据库的当前状态加载相应的知识库,另一个元知识库对系统进行初始化,对推理结果进行检测,确定推理是否结束。系统采用数据驱动的控制策略,对可用规则的搜索采用深度优先的搜索策略,同时加入了元规则控制,提高了推理效率。

3.1.2 以计算机模拟和运算为基础的专家系统

美国西北大学高性能钢研究组^[5](Steel Research Group,缩写SRG)开展了可计算材料设计,能对大范围内不同空间和时间尺度上发生的物理现象进行模拟。该小组的研究目标是探索材料设计的普遍方法、工具及建立数据库,并以高性能钢作为试验设计

对象,以材料的制备、结构、性能和使用效能关系为逻辑结构,利用计算模型和数据库,查询适合的组分和制备方案,得到符合设计要求的合金。SRG利用此框架已发展出具有优良特性的新合金,用于飞机、航空母舰、发动机等方面。

钢铁研究总院和东北大学^[6]联合开发了金属材料组织、性能预报及在线监测系统,该项目为国家高技术研究发展计划(863)重点项目。他们利用物理冶金学模型,对带钢热轧生产中各种金属学现象,如奥氏体的再结晶,奥氏体向铁素体、珠光体和贝氏体的转变等,进行计算机模拟,预测出轧后产品组织状态和力学性能,从而实现对产品性能质量的控制、工艺及组分的优化设计及在线检测,并且结合宝钢2050热连轧机开发出我国第一个具有知识产权的热轧带钢组织和性能预测软件。该系统目前已广泛用于各大钢厂,提高了成品率,取得了显著的经济效益。

3.1.3 以模式识别和神经网络为基础的专家系统

由于材料设计要素之间影响关系复杂,因此在专家系统的应用中,借助了模式识别、神经网络等人工智能方法。模式识别和神经网络是处理受多种因素影响的复杂数据集、用于总结半经验规律的有力工具。材料设计中的两个核心问题是组织结构—性能和制备工艺—性能的关系。这两类关系都受多种因素的制约,故可用模式识别和神经网络从已知实验数据集中归纳出数学模型,并据此预测未知材料的性能和达到此性能的优化配方及优化工艺。人工神经网络的优点是不用预先指定函数便能对强非线性在内的各类数据进行拟合、建模和预报;其拟合能力很强,是定量建模的有力工具。

中国科学院上海冶金研究所陆文聪等人^[7,8],利用模式识别方法研究了V-PTC陶瓷半导体材料 ρ/\min 与配方、生产工艺间的规律,设计了两个新配方并预报了相应的最佳工艺条件,提高了V-PTC材料 ρ/\min 值。该所化学键组^[9,10]建立了金属间化合物检索和预报专家系统。他们利用化学键和模式识别方法相结合,总结二元金属间化合物的晶型规律。在总结规律的基础上,合成并发现了EuNi₂、EuFe₂、LaPd₅、PrPd₅、NdIr₃等一系列新的金属间化合

物,它们的实测晶型也和预报的大体符合。刘刚^[11]建立的KDPA专家系统,把知识库、数据库、模式识别、人工神经网络和遗传算法五个模块连接在一起,组成辅助材料研制和新产品开发通用的专家系统。该专家系统已应用于设计高亮度绿色荧光粉新配方、PTC双功能半导体陶瓷的新配方并预报相应的最佳工艺条件、优化镍氢电池电极材料和设计优化含氟铋系高温超导体等等。

北京科技大学姚斌^[12]应用混合人工智能技术,利用遗传算法快速、全局收敛及增强式学习等性能,与误差逆传播学习算法相结合,将神经网络同专家系统相结合,建立了基于遗传算法的神经网络高炉专家系统。系统主要由炉况监测、炉温状态诊断、顺行状态诊断、炉体状态监视及数据管理等几个子系统组成,能同时监测十多种影响炉况扰动的因素变化。在其调试运行过程中,异常炉况的综合命中率达到92%,对减少事故发生率起到了积极作用。采用该专家系统对鞍钢10号高炉(2580 m³)的检测参数进行了实时处理,可以预报高炉炉热状态、炉温波动情况和炉况发展趋势,对异常状况的发生、变化趋势以及可能性大小作出了预测和预报,在此基础上,综合运用操作经验知识调整炉况,达到了高炉生产“顺行、稳定、均衡和安全”的要求。

3.2 材料智能加工与智能控制专家系统

智能加工与智能控制专家系统^[13]即将人工智能技术应用于加工过程的各个环节,通过模拟专家的智能活动,取代或延伸制造环境中的部分脑力劳动,从而在制造过程中,系统具有自组织能力,能自动监视其运行状态,在受到外界或内部激励时能够自动调整其参数,以达到最佳状态。此类专家系统具有解释、预测、诊断、规划、执行等功能。

材料智能加工研究始于20世纪80年代中期,其目标是通过在线传感器在材料制造过程中采集信息,并通过智能控制以实现控制决策,使制备中的材料能循着最佳途径成为性能优良、稳定以及成品率高的材料。用于材料生产的智能控制及系统建模在材料生产与成形过程中,涉及到化学成分配制、工艺参数选取、成型过程监控及过程参数协调等诸多因素,忽略任一因素都可能使成形过程中断或造成废品。由于该过程的复杂性、随机性和不确定性,使过程监测、预报和自动控制非常困难,长期以来,一直

宇航材料工艺 2004年 第4期

是材料工作者努力探索的研究课题。其实现途径主要为:模糊控制、基于专家系统的智能控制和神经网络控制。人工神经网络是由大量简单的处理单元广泛连接组成的复杂网络,具有人脑功能的基本特征:学习、记忆和归纳,从而解决了智能控制中的某些局限性,为控制领域的研究开辟了新的途径。

Osakada K^[14]对神经网络用于冷锻工艺设计专家系统进行了研究,采用三层BP网络实现了一次成形时的工艺选择和多工步中间毛坯设计。东北大学丁桦^[15]等运用BP神经网络对型材挤压过程的有限元模拟(FEM)结果所产生的样本进行组织训练,建立了模具几何参数与应力、应变等参数之间的映射关系,从而实现了挤压过程的建模,并以此为基础,建立了相应的专家系统。中南大学李桃^[16]开发了烧结过程智能实时操作指导系统。首次用人工神经网络解决烧结终点预报问题,实现了神经网络的快速在线学习,建立了基于多层前向神经网络的烧结终点自适应神经网络预报器,预报命中率达到90%以上。在武汉钢铁厂435 m²大型烧结机上进行了联机应用,成功地实现了烧结过程的全局控制,实现了稳定过程、优化指标、降低能耗的目标,取得了显著的经济效益。

3.3 材料缺陷诊断与质量控制专家系统

材料缺陷诊断与质量控制专家系统是在知识库中存储与材料缺陷检测及质量控制有关的知识,根据具体的问题设计其推理策略,实现对材料的缺陷、性能检测与控制等功能。

李桃等^[17]将数学模型、模糊技术和专家系统相结合,建立了烧结过程异常状况诊断专家系统。该系统通过知识获取,建立了烧结过程中出现的17种典型异常状况的表征现象集合,研究了烧结过程异常类型的模糊诊断模型。应用于烧结生产过程的实时在线诊断,诊断和操作决策的准确率在85%以上。

由于压铸过程复杂,许多因素可以导致压铸缺陷的产生,而缺陷与产生原因及消除措施之间不存在确切的一一对应关系,因此正确地判断压铸缺陷产生原因及提出准确的消除措施比较困难。为此沈阳铸造研究所卢宏远^[18]等开发了DCES压铸缺陷及对策专家系统。此系统在广泛收集领域知识的基础上,对压铸过程中常见的缺陷、原因及对策进行了归

纳整理,确定了三者之间的逻辑对应关系。采用了产生式规则、框架及过程等知识表达方式,使用正向和模糊推理机制及优先权法求解策略,较好地应用了专家处理压铸缺陷时的思路和方法。广西大学王春伟^[19]开发出的DADC专家系统,可用来寻找铸件产生缺陷的原因。整个DADC专家系统共开发了各种产生式规则1966条,它的推理机引入了不精确推理策略。

上海交通大学汪锐等^[20]把两个人工神经网络相串接应用于拉深件成形缺陷分析。第一个神经网络以缺陷拉深件的相关信息作为输入,以缺陷的原因为输出;第二个神经网络以第一个网络找出缺陷的原因为输入,最终找出解决方案。大连铁道学院侯英玮^[21]建立了锻件缺陷诊断及咨询专家系统原型,其中包括知识库和缺陷图形库,完成了咨询数据库、锻件质量分析、锻件缺陷咨询、帮助等模块的设计。缺陷图形库的建立使诊断更加直观。

4 专家系统在材料研究中的应用展望

专家系统在材料领域中的应用已经取得了一定的研究成果,为材料设计性能预测、智能加工和检测等提供了一种新型的方法,使材料的优化设计和精确控制成为可能。目前应用的专家系统的特点是专用性较强、针对特定问题而建,所以功能比较单一,基本未商业化。展望专家系统的发展趋势,预计作为材料领域应用的专家系统将向着高智能化、多功能集成化、网络化与多媒体化、商业化的方向发展。

(1) 高智能化

高智能化的内涵,一方面意味着专家系统所具备的知识的质量与数量将大大增加,知识与判据更加丰富和充分,尤其对于那些数据量巨大、复杂程度较高而模糊程度较低的推理过程的应用,专家系统的工作效率和判断的准确性可大大提高,甚至超过人类专家;另一方面,随着人工智能技术的不断成熟与发展,专家系统所采用的推理技术与方法由单一或少量几种发展为多技术综合应用、由简单或单向推理向复杂或多维推理发展,如将计算技术、人工神经网络技术、模糊技术、模式识别技术等多种人工智能技术结合形成综合系统,可大大提高推理与判断的准确性、可靠性与适应性。

(2) 多功能集成化

更多专业技术领域的技术专家与计算机专家共

同努力,将使专家系统的跨学科应用进入更高层次,专家系统将不再只针对解决单一目标问题,而是使系统同时具备多种功能,如将材料制备与加工的工艺过程控制系统同材料性能检测与缺陷诊断系统形成实时控制与实时监测的闭环系统,用于材料生产制备的全过程管理与控制,可大大提高成品率与生产效率;将材料优化设计、材料制备与加工的工艺过程控制、性能检测与缺陷诊断、模拟验证,甚至与CAD、CAM或一些大型计算模拟软件联合使用,可构成多功能集成的“巨型”专家系统。

(3) 网络化与多媒体化

由于网络技术的普及以及网络给人类带来的极大便利,基于网络的专家系统已经出现,而且呈现出强劲趋势,通过网络(局域网或广域网)可实现异地协同工作、资源共享和远程咨询等,使专家系统的应用范围更加宽泛和便捷,还可大大提高专家系统的使用效率与价值。专家系统的人机界面引入动画、音频、视频等多媒体技术,可使系统更加生动和人性化,使系统的推理、演示更加丰富、直观和逼真,并可帮助用户更快更好地掌握和使用系统。

(4) 商业化

基础性和共性是材料科学的基本特征,因此材料专家系统具有很大的商业价值。随着专家系统开发工具的不断发展和材料领域的各种标准不断统一与完善,将改变目前具有共性的材料专家系统重复开发、从头开始、自成体系的低水平、低效益的现状,建立具有共享性、通用性的商业化专家系统。同时为满足个性化或在专用性较强的领域中的应用,建立专家系统的通用化平台,提高开发起点,降低开发难度,使非计算机专业人员只需进行少量的、有针对性的开发就可以建立满足使用要求的专用系统,则具有更大的商业化前景。

参考文献

- 1 熊家炯. 材料设计. 天津:天津大学出版社,2000:9
- 2 Mitomo M et al. Computer aided innovation of new materials. Amsterdam New York: Elsevier Science Pub. Co.,1991:903
- 3 赖树刚,夏宗宁,吕允文. 陶瓷材料 ZrO_2 知识库的建立与性能预测的实现. 机械与电子,1991;(6):13~15
- 4 曹茂盛,黄龙男,陈铮. 材料现代设计理论与方法. 哈

尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2002:147~152

- 5 Olson G B. Designing a new material world. Science, 2000;228:993
- 6 东北大学 863 项目科研成果:组织性能预测技术开发. <http://www.ral.neu.edu.cn/kxyj/kycg.htm>
- 7 陆文聪,朱兴文,刘洪霖等. 多目标的模式识别优化法及其在 V-PTC 材料设计中的应用. 高等学校化学学报,1994;15(6):882~885
- 8 康德山,王学业,陆文聪等. 人工神经网络多目标法用于辅助 V-PTC 材料研制. 功能材料及器件学报,1995;1(2):115~118
- 9 Chen Nianyi, Li Chonghe, Yao Shuwen et al. Regularities of melting behavior of some binary alloy phases. Part 1. Criteria for congruent and incongruent melting. Part 2. Computerized prediction of melting points of alloy phases. Journal of Alloys and Compounds,1996;234:125~129,130~136
- 10 Chen Nianyi, Li Chonghe, Liu Gang et al. On the formation of ternary alloy phases. Journal of Alloys and Compounds, 1996;245:179~187
- 11 刘刚. 材料设计专家系统 KDPAAG 的原理、构成及应用. 中国科学院上海冶金研究所博士论文,1998
- 12 姚斌. 基于遗传算法的神经网络高炉专家系统研究. 北京科技大学博士论文,2000
- 13 蔡自兴. 智能控制——基础与应用. 北京:国防工业出版社,1998:75~84
- 14 Osakada K. Neural networks for process planning of cold forging. Annals of the CIRP,1991;40(1):242~246
- 15 丁桦,刘汉武,顾迎新等. 基于有限元模拟的型材挤压专家系统. 模具工业,2000;(1):16~18
- 16 李桃. 烧结过程智能实时操作指导系统的研究. 中南大学博士论文,2001
- 17 李桃,崔建军,姜涛等. 烧结过程异常状况诊断专家系统 SPADES(D)——系统总体规划. 中南工业大学学报,2001;32(4):355~359
- 18 卢宏远,李荣彬. DCES 压铸缺陷及对策专家系统构造原理. 铸造,2001;50(4):201~205
- 19 王春伟,赖炼,王强. 铸件缺陷分析诊断专家系统. 特种铸造及有色合金,2002;(2):18~19
- 20 汪锐,郑晓丹,何丹农. 应用人工神经网络专家系统进行拉深件成形缺陷分析. 金属成形工艺,2000;18(5):25~28
- 21 侯英玮,王晓明. 锻件缺陷诊断专家系统的研究. 塑性工程学报,2001;8(1):62~65