

# 材料科学中专家系统的发展及应用\*

刘 彬, 汤爱涛, 潘复生, 王敬丰

(重庆大学材料科学与工程学院, 重庆 400044)

**摘要** 综述了近 10 年来专家系统在材料科学中的发展和应用现状, 包括发展历史、涉及领域和应用类型, 重点讨论了目前应用最广泛的材料设计专家系统以及基于人工神经网络的材料专家系统的应用现状、存在问题及改进办法, 最后展望了专家系统在材料科学中的发展趋势。

**关键词** 专家系统 材料科学 材料设计 人工神经网络

## Development and Applications of Expert Systems in Materials Science

LIU Bin, TANG Aitao, PAN Fusheng, WANG Jingfeng

(College of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044)

**Abstract** The development and applications of expert systems in materials science in the past decade are reviewed with more attention to the development history, application areas and application types. The development status, existing problems as well as improvements of expert systems used widely for material design and based on artificial neural network are discussed emphatically. The development trend of expert systems in materials science is also prospected.

**Key words** expert system, materials science, material design, artificial neural network

### 0 引言

专家系统(Expert Systems, ES)是一种模拟人类专家解决领域问题的计算机程序系统, 其善于处理强非线性关系, 特别适用于需要大量专家经验与知识来解答问题的领域。专家系统一般由知识库、数据库、推理机、解释部分以及接口 5 部分组成。其工作方式亦可简单地归结为: 运用知识, 进行推理。

将先进的专家系统技术应用于材料科学领域, 可以摆脱长期以来依赖实验先行且消耗大量人力、物力和时间的研究方法, 在专家系统的指导下用较少的实验获得较为理想的结果, 达到事半功倍的效果<sup>[1]</sup>。专家系统技术的迅速发展为材料科学的研究及发展提供了新的有效途径。

### 1 材料科学中的专家系统发展概述

#### 1.1 发展历史

材料科学领域的专家系统研究始于 20 世纪 80 年代早期, 最早报道的是 1982 年由丹麦 F. L. Smith 公司研制的水泥窑模糊逻辑控制系统<sup>[2]</sup>。1983 年英国 A. Matthews 等建造了基于智能知识的耐摩覆层材料选择专家系统<sup>[3]</sup>。在早期材料专家系统的影响下, 日本、德国及其它一些国家都相继开展了这一领域的研究。我国对材料科学领域专家系统的研究始于 80 年代晚期, 1989 年中科院上海冶金研究所<sup>[4]</sup>建立了 IMEC 专家系统, 为无机材料设计和合金设计提供了有益经验。

从国内外的报道看, 专家系统在材料领域的研究历史虽短, 但发展很快。至 20 世纪 90 年代, 专家系统在材料科学领域的

研究已成为热点, 而近年来, 专家系统已走出实验室, 开始在材料科学各领域得到应用。材料科学亦呈现出由实验科学向计算科学发展的趋势<sup>[5]</sup>。

#### 1.2 应用领域

材料按本身的性质分, 主要有金属材料、无机非金属材料、高分子材料、复合材料等。按材料的作用分, 有结构材料和功能材料。图 1 为近 10 年材料科学领域里按作用和按性质分类的专家系统百分比。

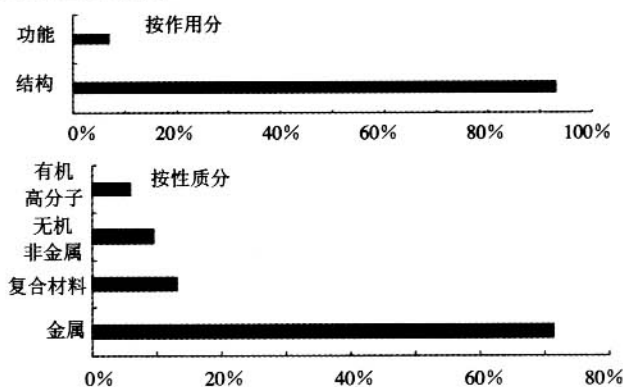


图 1 近 10 年材料科学领域里专家系统应用的百分比

由图 1 可见, 作为结构材料之用的金属材料主导了近 10 年材料领域专家系统的发展。两个理由可以解释此现象: 其一, 人类使用金属的历史超过 3000 年, 由于其优良的机械性能和易加工性, 以钢铁为代表的金属材料早已遍布各行各业, 广袤的市场

\*“十一五”国家科技支撑计划(2006BAE04B09-7); 重庆市攻关项目(CSTC, 2005CF4001)

刘彬: 男, 1982 年生, 博士研究生, 主要从事镁合金和计算材料学方面的研究 E-mail: 8240668@163.com

需求促使该领域专家系统的高速发展;其二,大多数组织在考虑新技术时喜欢只需最少资源且最可能成功的项目。由于金属材料使用和研究时间最长,积累了远超其他材料的理论和经验知识,因此相对更易开发专家系统。

具体说来,国内外金属材料领域专家系统都主要集中在制造成型方面,包括机加工、塑性变形、热处理等。而复合材料、无机非金属材料、高分子材料方面,由于这些材料性质所致,专家系统基本应用于功能材料领域,包括防腐、耐磨等复合材料覆层制备;光感、压电等功能材料的设计;传统塑料和阻燃等特种聚合物材料的控制和生产。

### 1.3 应用类型

专家系统可以按照多种不同的方法进行分类。根据构建的方法,可分为基于人工神经网络的专家系统、基于产生式规则的专家系统、基于框架的专家系统和基于 Web 的专家系统;根据待求解的问题类型,专家系统又可分为以下 11 大类:控制、设计、诊断、教学、解释、监视、规划、预测、调试、优选、仿真<sup>[6]</sup>。从文献统计结果来看,近 10 年材料科学领域的专家系统主要涉及其中 7 个 大类。图 2 是按照各专家系统最主要的任务类型进行分类而得出的统计图。

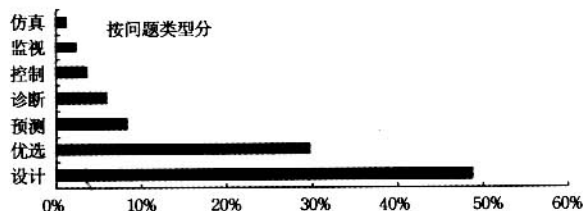


图 2 近 10 年材料科学领域里专家系统应用的百分比

如图 2 所示,材料科学领域专家系统的主要功能就是设计和优选。两者之和占到已建造专家系统总量的 80%,其原因之一就是材料科学发展的要求。现今先进材料的研制已不能停留于过去依靠海量实验和追加投入上,迫切需要基于研发目标的原材料和设备的选择以及制造工艺的设计,以此作为间接指导甚至直接实现的途径。另一个原因就是设计和优选类专家系统更易开发。长期的材料研究及制备加工为其积累了大量的理论和经验知识。

## 2 材料设计专家系统

材料设计专家系统是指具有相当数量积累的经验、归纳的实验规律和总结的科学原理,且能应用这些知识求出满足设计材料约束的目标工艺的计算机程序系统。

近年来,材料设计专家系统已在复合材料设计、合金材料设计及成形等过程中得到了开发和应用<sup>[7-10]</sup>。它们不仅有利于方便一般科技人员学习、掌握有关材料设计的工艺知识,而且,还能大幅度地减少新产品的研制、开发的时间和经费,并降低产品的生产成本。

2004 年许春义等研制了铝合金焊接工艺设计专家系统<sup>[11]</sup>。该系统可以被多个用户在企业的局域网上同时使用。深圳大学的张培新等开发了矿渣微晶玻璃专家系统<sup>[12]</sup>,可对这一领域新材料的设计作出指导和辅助。1999 年 Universitat Dortmund<sup>[13]</sup>开发了对机敏材料进行智能设计的专家系统,可用于旋转发动机转子和压缩机的复合材料的设计中。同年,Sang B. Park<sup>[14]</sup>

建造了电子元器件连续冲模设计专家系统,它的成功应用对该领域的设计者提供了极大的帮助。

材料设计专家系统虽起步较早,数量最多且占据研发主流,但它的发展仍存在一些 问题。

(1) 材料设计涉及材料的组分、工艺、性能之间的关系,但这些内在的规律往往不甚清楚,特别是缺乏有助于建模的定量规则。

(2) 开发新型材料一直是材料科学的发展方向,但人们对新材料知之甚少,特别是其问题的复杂性和信息的模糊性使开发新型材料设计专家系统面临更大困难。

为弥补设计类专家系统缺乏直接由数据获得规则的能力,目前比较有效的方法是引入人工神经网络等其他智能技术。目前国内也对材料设计专家系统的工作开始予以高度重视,并不断取得进展,如北京理工大学<sup>[15]</sup>开发的聚合物阻燃材料专家系统 FRES 2.0,福州大学<sup>[16]</sup>研制的汽车制动复合材料智能设计系统,中南大学<sup>[17]</sup>建立的熔融拉锥工艺参数的优化系统等。今后发展的趋势是尽可能地把智能技术结合起来,发挥共有长处,以便更有效地解决材料设计问题。

除了材料设计,专家系统还在材料优选<sup>[18-24]</sup>、性能预测<sup>[25,26]</sup>和缺陷诊断<sup>[27-29]</sup>、加工过程仿真<sup>[30]</sup>、监视<sup>[31,32]</sup>和控制<sup>[33,34]</sup>方面发挥日益重要的作用,而且随着材料研发水平的提高,为满足高性能材料对加工工艺的要求,以及降低成本、保障安全和提高生产率的需要,可以预测,材料专家系统将会迎来长足的发展,也会涌现各类新型专家系统。如何运用专家系统及相关智能技术适应这一巨大发展,将是未来材料领域专家系统研究的重要课题。

## 3 人工神经网络材料专家系统

从专家系统的构建方法看,由于材料科学本质的非线性,许多过程难以用传统的数学模型进行准确描述。人工神经网络不需要任何先验函数的假设,也不需要预先给定公式的形式,直接从已有的实验数据出发,经过有限次迭代计算而得到一个反映实验数据内在规律的数学模型,而且还可利用经过训练的网络模型进行推理预测,特别适合于研究复杂非线性系统。在材料领域中,人工神经网络已用于材料选择、成分设计、智能加工与控制、工艺优化、相变规律的研究,特别是在材料性能、缺陷以及相变点等预测方面,应用更为突出。

西北工业大学的曾庆丰等<sup>[35]</sup>开发了基于人工神经网络的原位硬化  $\text{Si}_3\text{N}_4$  设计专家系统。江苏大学的武仪等在传统专家系统的基础上,加入人工神经网络模块,建立了基于人工神经网络的混合智能型常用齿轮材料选择专家系统<sup>[36]</sup>,得到的结果令人满意。2004 年西安交大的程羽等采用基于人工神经网络的专家系统<sup>[37]</sup>,建立了颗粒增强金属基复合材料的本构方程,比较准确地实现了工艺参数与流动应力之间关系的预测。

重庆大学的汤爱涛等正在研究基于人工神经网络的镁合金专家系统,模型的输入包括镁合金的主要合金元素含量,铸造或变形处理工艺,热处理的温度和时间,以及测试温度;模型的输出为 3 个力学性能指标,即抗拉强度、屈服强度和延伸率。目前已取得的进展如下:镁合金抗拉强度、屈服强度和延伸率的数据预处理方式分别为  $[0.1, 0.8]$ 、 $[0.01, 0.99]$  和  $[0.01, 0.99]$ ,中间层结构为单隐层,单元数分别为 10、11 和 12 且均采用 LM

算法时,能取得最佳效果。其次,应用得到的最佳模型预测了 AZ61B 及 Mg-Zn-Zr-Y 变形镁合金的室温力学性能。预测结果与实验值大多很吻合,其中抗拉强度和屈服强度的效果尤佳,抗拉强度的最大相对误差不超过 6.5%,屈服强度的最大相对误差不超过 16%,但延伸率的效果较差,特别是对合金的突然脆化反应迟钝。此外,还对 Mg-Al-Zn 合金的铸态室温力学性能进行了预测,预测结果在可接受范围之内,其变化趋势亦可从显微组织分析得到印证<sup>[38]</sup>。

传统的专家系统和人工神经网络虽然是适用于不同情况的两种不同层次的人工智能技术,但它们之间的关系不是相互排斥,而是相互补充的。利用人工神经网络技术的知识获取能力强,信息的分布并行处理、容错性好等优点<sup>[39]</sup>,将人工神经网络技术与传统的专家系统相结合已成为开发材料专家系统的重要方法,但目前神经网络方法本身还不完备,学习效率低、训练速度慢、理解功能弱等问题使其实用化大受影响<sup>[40]</sup>。进一步扩大用于建模训练的基础数据样本、采用更合理的数据预处理方式、选择更恰当的模型参数都将有助于系统整体能力的提高。

#### 4 材料科学中的专家系统发展趋势

回顾近 10 年来材料科学领域专家系统的发展与应用情况,可以看到专家系统已涉及到从材料选择、成分分析、工艺设计、过程监控、故障诊断等研发和生产一系列过程,其中设计和选材型专家系统目前占据着研发和应用的主导。近年来,由于智能技术的升温,为进一步解决目前专家系统存在的问题,如建模规则缺乏、功能比较单一、知识获取困难、对动态和复杂过程的适应性较差等,同时为更好地处理材料的各种非线性关系,基于人工神经网络的材料专家系统得到较快发展。专家系统在材料科学中的应用已经对材料科学的发展起到了积极的推动作用。

目前,专家系统的开发和研究已进入稳步上升的阶段。展望未来,材料科学中的专家系统将会朝着实用化、商品化的方向发展。

功能强大是材料专家系统实用化和商品化的基础。伴随专家系统理论和技术的进步,尤其是在有效解决知识表示和获取、提高系统推理能力的前提下,集成多智能技术的混合系统,将克服单一技术不足的缺点,成为材料类专家系统的发展趋势,国外在此方面的研究进展较快<sup>[26,41]</sup>。

开发新型专家系统是实现材料专家系统实用化和商品化的途径。例如,实时专家系统将考虑时间因素,可以更准确地控制材料加工过程。分布式专家系统可以把 1 个专家系统的功能经分解后分布到多个处理器上并行工作,从而从总体上提高处理效率。协同式多专家系统更将集材料各领域交叉合作大成,实现模块化设计,从而大大扩展专家系统的应用范围。

信息技术的集成是材料专家系统实用化和商品化的保障。多媒体技术、计算机网络、远程通讯、数据库、过程控制、并行计算等技术都会逐渐应用到材料各类专家系统中。例如,多媒体技术可以极大地提高人机交互性,帮助用户更快、更好地掌握和利用专家系统;在基于网络的专家系统基础上,建立与 Web 连接的新型关系数据库和知识库,实现异地协同工作和维护、远程访问、资源共享等,这不但方便了专家系统的应用和服务,更无疑大大提高了专家系统的价值。

可以预料,随着时间的推移,材料领域中的专家系统会日趋

成熟,此方面的研究和应用将会出现一个新的高潮。

#### 参考文献

- 1 邱冠周,王海东,黄圣生. 人工智能在材料设计中的应用. 中国有色金属学报,1998,8(增刊2):836
- 2 Holmblad L A, Ostergaard J J. Control of a cement kiln by fuzzy logic. Fuzzy Inf and Decis Processe, North Holland, 1982. 389
- 3 Matthews A, Swift K G. Intelligent knowledge-based systems for tribological coating selection. Thin Solid Films, 1983,109(4):305
- 4 周班,金石鸣,邵俊,等. IMEC-金属间化合物检索和预报的专家系统. 金属学报,1989,25(3):203
- 5 白润,郭启雯. 专家系统在材料领域中的研究现状与展望. 宇航材料工艺,2004,(4):17
- 6 蔡自兴,[美]约翰德尔金,龚涛. 高级专家系统:原理、设计及应用. 北京:科学出版社,2005. 14
- 7 宋桂明,周玉,雷廷权. 复合材料设计的回顾与展望. 固体火箭技术,1997,20(4):53
- 8 富威,王鹏,李庆芬. 基于 Web 的复合材料设计专家系统. 哈尔滨工程大学学报,2006,(6):773
- 9 邵卫军,钟春生. 合金材料设计专家系统前景. 中国铝业,1997,10:47
- 10 刘相华,王国栋. 人工智能技术在材料成形中应用的进展. 哈尔滨工业大学学报,2000,32(5):87
- 11 许春义,周丽华,魏艳红,等. 基于 Client/Server 的铝合金焊接工艺设计专家系统. 焊接,2004,(1):19
- 12 张培新,文岐业,刘剑洪,等. 矿渣微晶玻璃专家系统的开发. 计算机与应用化学,2006,23(8):786
- 13 Fathi Torbaghan M, Hildebrand L. Intelligent design methods for smart materials. Proceedings,1999,2:1011
- 14 Sang B Park. An expert system of progressive die design for electron gun grid parts. J Mater Proc Techn,1999,88:216
- 15 夏军涛,黄聪明,王建祺. 聚合物阻燃材料专家系统 FRES2.0 的设计. 计算机与应用化学,2000,17(6):525
- 16 林有希,高诚辉,柳丽娜. 汽车制动复合材料智能设计系统研制. 计算机工程与应用,2006,(9):86
- 17 易子旭,谢敬华,侯玲瓏. 熔融拉锥工艺参数的优化及其系统实现. 中国机械工程,2007,18(6):738
- 18 吴崇峰,姜珊. CAD 塑料材料选择系统. 中国塑料,1998,12(3):34
- 19 薛克敏,夏永江,许沂,等. 筒形件错距旋压工艺参数选择专家系统. 中国有色金属学报,1998,8(增刊1):168
- 20 Mookherjee R, Bhattacharyya B. Development of an expert system for turning and rotating tool selection in a dynamic environment. J Mater Proc Techn,2001,113(1-3):306
- 21 Kumar S, Singh R. An intelligent system for selection of die-set of metal stamping press tool. J Mater Proc Techn, 2005,164-165:1395
- 22 成晓林,张根保,胡立德. 数据库支持的材料选择模糊专家系统的研究. 计算机工程与设计,2001,21(4):21



- waveguide amplifiers. *J Appl Phys*, 2003,93(9):5008
- 32 Ting Chuchi, Chen Sanyuan, Hsieh Wenfeng, et al. Effects of yttrium codoping on photoluminescence of erbium-doped  $\text{TiO}_2$  films. *J Appl Phys*, 2001,90(9):5564
- 33 Patra A, Friend C S, Kapoor R, et al. Effect of crystal nature on upconversion luminescence in  $\text{Er}^{3+} : \text{ZrO}_2$  nanocrystals. *Appl Phys Lett*, 2003,83(2): 284
- 34 Pi X D, Zalloum O H Y, Wojcik J, et al. Formation and oxidation of Si nanoclusters in Er-doped Si-rich  $\text{SiO}_x$ . *J Appl Phys*, 2005,97:096108
- 35 Korzanski M B, Lecoer Ph, Mercey B. Low propagation losses of an  $\text{Er} : \text{Y}_2\text{O}_3$  planar waveguide grown by alternate-target pulsed laser deposition. *Appl Phys Lett*, 2001, 78(9): 1210
- 36 Zhang X T, Liu Y C, Ma J G, et al. Room-temperature blue luminescence from  $\text{ZnO} : \text{Er}$  thin films. *Thin Solid Films*, 2002,413: 257
- 37 Yeh D C, et al. Multiphonon relaxation and infrared-to-visible conversion of  $\text{Er}^{3+}$  and  $\text{Yb}^{3+}$  ions in barium-thorium fluoride glass. *J Appl Phys*, 1987,62(1):266
- 38 Lin Hai, Gerald Meredith, Jiang Shibin, et al. Optical transitions and visible upconversion in  $\text{Er}^{3+}$  doped niobic tellurite glass. *J Appl Phys*, 2003,93(1): 186
- 39 Huang Lihui, Liu Xingren, Xu Wu, et al. Infrared and visible luminescence properties of  $\text{Er}^{3+}$  and  $\text{Yb}^{3+}$  ions codoped  $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  glass under 978 nm diode laser excitation. *J Appl Phys*, 2001,90(11): 5550
- 40 Zhang Delong, Hua Pingrang, Xu Yuheng, et al. Judd-ofelt analysis of spectroscopic property of  $\text{Er}^{3+}$  in congruent and near-stoichiometric Zn/Er-codoped  $\text{LiNbO}_3$  crystals. *J Appl Phys*, 2007,101:053523-1
- 41 苏洁梅, 戴基智, 杨亚培. 光波导放大器的研究进展. *激光技术*, 2004,28(6):604

(责任编辑 胡晓)

(上接第3页)

- 23 Singh R, Sekhon G S. An expert system for optimal selection of a press for a sheet metal operation. *J Mater Proc Techn*, 1998,86:131
- 24 Wong S V, et al. Generalized fuzzy model for metal cutting data selection. *J Mater Proc Techn*, 1999,89-90:310
- 25 Yao Lixiu, Qin Pei, Chen Nianyi, et al. TICP—an expert system applied to predict the formation of ternary intermetallic compounds. *Calphad*, 2001,25(1):27
- 26 Shibendu Shekhar Roy. Design of genetic-fuzzy expert system for predicting surface finish in ultra-precision diamond turning of metal matrix composite. *J Mater Proc Techn*, 2006,173(3):337
- 27 徐晓, 吴新南, 张河清. 输气管道缺陷及寿命评估专家系统. *华南理工大学学报(自然科学版)*, 2000,28(5):69
- 28 邓宗白, 周克印, 吴永端. 飞机连接耳片故障诊断疲劳损伤评估专家系统. *南京航空航天大学学报*, 2003,35(1):44
- 29 Dwivedi S N, Sharan A. Development of knowledge-based engineering module for diagnosis of defects in casting and interpretation of defects by nondestructive testing. *J Mater Proc Techn*, 2003,141(2):155
- 30 詹一民, 陈定方, 张晓川, 等. 对象嵌入与链接技术在挤出模智能仿真系统中的应用. *武汉理工大学学报(交通科学与工程版)*, 1996,20(2):191
- 31 黄龙男, 王正平, 张德庆, 等. 复合材料固化过程的智能化监控及其智能生产系统. *复合材料学报*, 2002,19(2):1
- 32 Felix T S Chan, Henry C W Lau, Bing Jiang. In-line process conditions monitoring expert system for injection molding. *J Mater Proc Techn*, 2000,101(1-3):268
- 33 Postlethwaite I, Atack P A, Robinson I S. The improved control for an aluminium hot reversing mill using the combination of adaptive process models and an expert system. *J Mater Proc Techn*, 1996,60(1-4):393
- 34 蒋键, 张弘, 薛锦诚, 等. 复合材料胶接过程的微机控制系统. *北京理工大学学报*, 1996,16(3):328
- 35 Zeng Qingfeng, Zu Jiakui, Zhang Litong, et al. Designing expert system with artificial neural networks for in situ toughened  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . *Materials Design*, 2002,23(3):287
- 36 武仪, 李新城, 朱伟兴. 基于神经网络的混合智能型齿轮选材专家系统研究. *现代制造工程*, 2003,(8):29
- 37 程羽, 臧顺来, 陈德礼, 等. 一种建立颗粒增强金属基复合材料本构方程的新方法. *复合材料学报*, 2004,21(4):110
- 38 刘海定. 基于数据的镁合金专家系统基础模型的研究: [硕士学位论文]. 重庆: 重庆大学, 2005
- 39 吴良. 人工神经网络(ANN)智能技术与热处理. *纺织机械*, 2001,(4):36
- 40 张宝友, 李辰砂, 李晓峰, 等. 专家系统在复合材料生产中的应用. *高技术通讯*, 2001,(8):105
- 41 Jung-Seok Kim. Development of a user-friendly expert system for composite laminate design. *Composite Structures*, 2007,79(1):76

(责任编辑 张敏)