

神经网络和专家系统复合材料优化设计研究

杨 榛 顾幸生 梁晓恽 凌立成

(华东理工大学, 上海 200237)

文 摘 论述了复合材料设计及优化的基本方法,介绍了神经网络和专家系统人工智能方法,并对复合材料设计及优化中的两种智能方法进行了详细论述,总结了两种方法在复合材料优化设计中的分类、建模、预测和应用。举例说明了神经网络和专家系统方法在复合材料优化设计中具有重要的研究价值。最后对该领域的发展提出了建议。

关键词 复合材料优化设计,神经网络,专家系统,智能融合

Neural Networks and Expert Systems in Composite Optimized Design

Yang Zhen Gu Xingsheng Liang Xiaoyi Ling Licheng

(East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

Abstract Basic research methods of composite design and optimization were described. Two typical artificial intelligence methods (Neural Networks and Expert Systems) were introduced. Two kinds of intelligence theory and examples to application in composite design and optimization were all discussed in detail. Next, the basic research methods and application property of classifying, modeling, predicting about the two kinds of integrated method in composite design were summarized. We conclude that artificial intelligence method plays an important role in the research of composite optimized design. Finally some recommendations to the development in the field of composite design are made.

Key words Composite optimized design, Neural Networks, Expert Systems, Intelligent integration

1 引言

复合材料既能保留原组分材料特色,并通过复合效应获得原组分材料不具备的性能,还可通过材料设计使各组分性能相互补充彼此关联,获得新的性能^[1~2]。随着材料科学的发展,复合材料已成为新材料主体,在许多高科技产业中,已逐步取代木材及金属合金,广泛应用于航空航天、汽车、电子电气、建筑、健身器材等领域^[3~4]。复合材料研究和制备过程是一项复杂的工程。目前,研究新材料的主要工作模式是“炒菜”式^[5],没有利用历史数据来进行预测优化,“材料设计”及其优化是解决上述问题的理想途径。

“材料设计”,是指通过理论与计算预报新材料的组分、结构与性能,即:通过理论设计来“订做”具有特定性能的新材料^[6]。复合材料的突出特性是在

结构和性能上具有可设计性^[7]。复合材料科学的发展趋势是材料设计的优选化,以实现复合材料从被动选择到主动设计的飞跃^[8~9]。本文着重讨论智能方法的材料设计,因为在复合材料研究领域所遇到的大量问题都是机理尚未完全清楚、配方组成复杂、影响因素众多、数学模型很难准确化等问题。而采用智能方法来实现这类不精确的、不易表达的、非线性信息的处理是合适的。

神经网络(NN)和专家系统(ES)是人工智能(AI)的两大前沿。智能理论引入到材料设计与优化中,开创了复合材料设计与优化的新局面^[10]。本文就神经网络和专家系统及其融合技术做一详细讨论。

2 神经网络

2.1 概述

收稿日期:2008-01-29

基金项目:国家自然科学基金(50672025)

作者简介:杨榛,1973年出生,博士研究生,主要从事材料体系的建模与优化设计工作。E-mail: yangzhen@ecust.edu.cn

神经网络是用工程技术手段模拟生物神经网络结构特征的一类人工系统。它用非线性处理单元来模拟生物神经元,用处理单元之间的可变联接强度(权值)来模拟突触行为,从而构成一个大规模并行的非线性系统。神经网络具有自适应性,在整个学习过程中无需外界参与,它能从已有例证和数据中自动归纳出规则,取得知识^[11~12]。神经网络具有强大的自适应、自学习能力,能够从已有的试验数据中获取有关材料的组分、工艺、组织和性能之间的规律。对于复合材料参数预测问题,神经网络方法避免了传统的参数预测方法的不足,提高了预测的准确性和快速性。神经网络方法对多参数多步预测问题更具有突出优点,正好适合于材料设计和性能预测这一类问题。东京大学工业技术研究所的安井至认为神经网络方法将是解决材料设计和性能预测的有希望的方法之一^[13]。

目前已有几十种神经网络模型,它们是从各个角度对生物神经系统不同层次的描述和模拟。如 BP (Back Propagation) 网络、Kohonen 网络、Hopfield 模型、RBF 网络、GRNN (General Regression Neural Network) 等。BP 网络使用最多,其可靠性及应用性已在广泛使用中得到证实。它的基本结构见图 1^[14]。

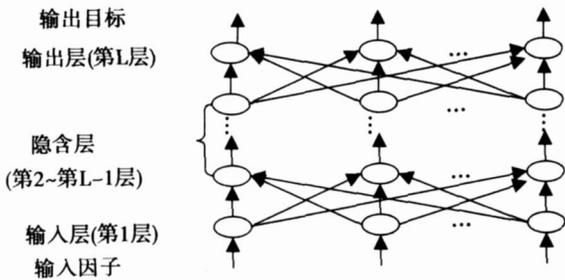


图 1 BP网络的基本结构
Fig 1 Basic structure of BPNN

在 BP 网络示意图中,设 w_{ji}^l 为 $l-1$ 层上节点 i 至 l 层上节点 j 的连接权值, ne_j^l 和 ou_j^l 分别为 l 层上节点 j 的输入值和输出值, X_i ($i=1, \dots, N$) 为网络的输入因子, f 为转换函数。其输入输出关系如下:

$$\begin{cases} ou_j^0 = x_j & (j = 0, 1, \dots, N) \\ ne_j^l = \sum_{i=0}^{pot(l-1)} w_{ji}^l ou_i^{l-1} & (l = 2, 3, \dots, L) \\ ou_j^l = f(ne_j^l) & [j = 1, 2, \dots, pot(l)] \\ \hat{E}_j = ou_j^L & (j = 1, 2, \dots, M) \end{cases}$$

其中 $pot(l)$ ($l=1, 2, \dots, L$) 为各层节点数,且 $pot(1) = N, pot(L) = M, \hat{E}_j$ 为设计目标 E 的估计值。

网络的学习或者训练是指通过某种算法调整网络中的参数,使网络的输入输出映射 $x \rightarrow y$ 逼近某一指定的映射 $x \rightarrow y_0$ 。BP 网络的学习过程是通过误差反传算法调整网络的权值 w_{ji} , 使网络对于已知样本目标值的估计值与实际值之误差最小。

材料设计从广义上来说包括性能预测、工艺优化、材料生产过程的控制、材料识别、结构优化等诸多方面。以利用 BP 网络的材料性能设计模型(见图 2)为例,在预测模型系统原理图中相关因素与 BP 网络的输入层对应。它可以是材料的成分、各种工艺条件等;隐含层的神经元是模拟神经网络计算过程建立起来的,它可将各种材料的化学成分和工艺参数等数据抽象到较高层次概念上,使神经网络具有非线性分类能力;BP 网络通过前向计算可得到输出层输出数据,该数据则与设计目标相对应;BP 网络的权值以数据文件方式存储,其数值根据 BP 网络的实际输出与期望输出的误差值利用反向传播学习算法来修正^[15]。

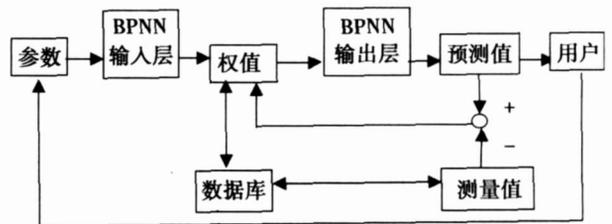


图 2 BP网络的材料性能预测模型系统原理图
Fig 2 Diagram of BPNN performance prediction model system

2.2 应用实例

在材料设计过程中可以充分利用神经网络的建模能力。先在一定量实验的基础上训练网络,进行有限外推,找到在实验范围之外可能存在的良好性能区,在优化的基础上进行实验,再用实验所得的结果对网络再训练,再外推,如此反复进行,直至获得较佳的参数,这样可以明显减少材料研制过程中的实验次数,节约研发成本,避免盲目性,较快地完成新材料的研制设计。

基于神经网络的复合材料设计取得了一定的成功。如陈宏星等人将神经网络引入复合材料板刚度的识别,他们利用正交各向异性板的动态特性来识别刚度,同时给出了事例用来验证此方法的有效性^[17]。神经网络也用于复相陶瓷刀具材料应用,文献 [18]

利用基于 BP 算法的人工神经网络技术,建立了预测颗粒增韧多相陶瓷刀具材料各组分体积分数的预测模型,模型结合材料性能合理地确定输入参数。利用该模型实际开发了 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{TiC}/\text{SiC}$ 系复相陶瓷刀具材料,材料的力学性能满足要求。文献 [19] 根据已有烧结合成 $\text{O}'\text{-SiAlON-BN}$ 的实验数据,利用改进后的神经网络,构筑了材料相组成及性能的预测模块。在此基础上,探索了合成 $\text{O}'\text{-SiAlON-BN}$ 复合材料的工艺条件,并通过实验结果进行了验证。K K Taylor 等人预测了 34 种聚合物的介电常数和 20 种聚合物复合材料的电导率,采用 31-5-1 模型来实现,也取得了较好的结果 [20]。

除了 BP 网络,目前像径向基函数 (RBF) 等网络在材料的优化设计中也有探索性应用。本研究在碳材料黏结剂添加剂改性实验数据的基础上,将神经网络方法用于研究添加剂配方和热处理温度对粘结强度的影响关系,建立添加剂改性碳材料黏结剂的 RBF 神经网络性能预报模型,结果表明:该模型对于粘结强度的预报平均相对误差为 0.0127。因此,RBF 神经网络模型的预报能力较好,得出了具有较精确粘结性能的添加剂配方和热处理数据。可望在碳材料黏结剂改性中的多变量、非线性体系中提高实验工作效率,为材料设计提供一条有应用前景的理论设计途径 [16]。

3 专家系统

3.1 概述

自从 1965 年 E. A. Feigenbaum 研制成功世界上第一个专家系统 (DENDRAL) 以来 [21],由于计算机技术的发展和在材料科学中的应用,促使人们依据材料科学的知识系统把大量的实验资料贮存起来,形成可供参阅的综合数据库,并构成知识库,逐步形成材料设计专家系统。专家系统可以模拟人类思维过程和推理策略,解决专家才能够解决的疑难或复杂问题。将专家系统技术引进到复合材料领域中,不仅使得人工智能同国民经济,科学技术需要解决的实际问题联系起来,产生巨大的经济效益,也使得为数不多的专家的能力得到了延伸。国内外已建立了一批材料设计专家系统 [22~24]。

专家系统能够为复合材料设计提供支持的原因,在于设计过程的结构及复杂性适用于传统的材料优化设计过程。专家系统的一般结构如图 3 所示 [25]。各部分内容和功能如下。

(1) 知识获取:将领域专家提供的知识通过知识工程师或机器学习系统表示成计算机可处理的形式

存入、修改和充实知识库的过程。

(2) 知识库:用于存放常识性知识、领域专门知识和规则等。

(3) 推理机:进行推理或问题求解。包括:控制、调度和执行推理求解程序。

(4) 解释器:根据用户要求,通过解释器给出用户易于理解的推理过程的解释。

(5) 人机接口:负责用户和领域专家与智能专家系统之间的交流和沟通。

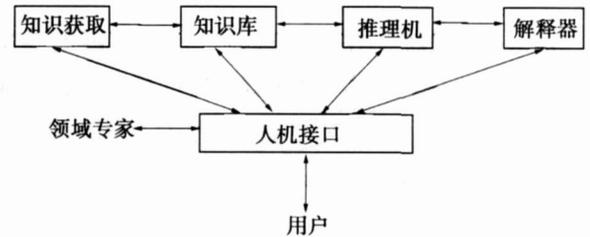


图 3 专家系统的一般结构框架

Fig 3 Structure of Expert System

3.2 应用实例

20 世纪 80 年代,专家系统潜在的应用前景使材料科学领域专家设计系统的研究和开发逐渐深入。到目前为止,欧美等国材料科学工作者已经对专家系统在建筑材料、电子陶瓷、聚合物复合材料等领域的应用进行了许多研究。取得了很多成果:如 KZK 粉末技术公司开发的 Pow-Con 专家系统软件已经可用于陶瓷材料的生产过程 [26]; S K Victor 等在 1993 年提出了采用不同规则的多专家系统来制备粉末陶瓷元件 [27]。我国的陆文聪等人建立了能检索和预报 PTC 和 V-PTC 材料性能与其配方及工艺间双向关系的专家系统 VPEC [28]。文献 [29] 阐述了陶瓷复合材料 $\text{Fe}_3\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 的材料设计专家系统原型的组成及实现。文献 [30] 建立了一个压电复合材料设计专家系统的原型,由一个推理机、三个材料知识库、两个元知识库以及辅助性功能模块组成,能够模拟材料设计专家提出设计方案。

4 神经网络融合专家系统

智能方法发展到今天,逐渐形成了融合发展的态势。混合型智能方法往往可以相融相生,取长补短。将混合型智能方法应用到材料设计中将是未来复合材料优化设计的发展方向。

专家系统在材料设计中的应用取得了一定的成果,但是,也有明显的不足。传统的专家系统,以专家

建立的规则为基础,以演绎法进行设计,着眼于有关材料物理化学方面的理论来分析、推理、并预测复合材料的性能,它除了在知识表达、知识获取的“瓶颈”问题的困难之外,还存在下列一些弱点。

(1)专家系统以规则为基础,进行逻辑推理,但就材料设计而言,材料的组分、工艺与性能之间的内在关系往往不很清楚。特别是缺乏定量的规则。

(2)专家系统主要依赖专家提供已有的知识获得规则,通过专家咨询来采集和整理专家的知识,耗时费力,挂一漏万,直接由数据中获得规则的能力较差。

(3)专家系统往往是针对某一具体问题的专用系统。对于不同的问题,存在着不同的规则。很难成为通用工具。

与传统的专家系统相比较,神经网络具有如下特点:

(1)它既可以解决定性问题,又可解决定量问题,具有较好的可靠性;

(2)擅长于处理复杂的多维的非线性问题,理论上证明,任何函数都可用它以任意程度逼近;

(3)它具有自学习能力,可以从已有的数据中总结规律,而不依赖于“专家”的头脑。

神经网络具有从例证和数据中取得规则的能力,而传统专家系统则具有说明推理过程的能力,促发人们把两者有机结合起来,构成智能化设计大系统,大大加强了复合材料设计能力。基于神经网络的专家系统的构造主要是针对知识获取模块和推理机的设计而言的。将神经网络以神经子网的形式嵌入在产生式规则中,实现专家系统和人工神经网络的结合。神经网络混合专家系统的基本结构如图4所示。

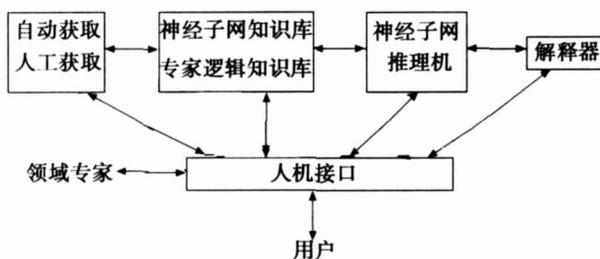


图4 神经网络混合专家系统的基本结构

Fig 4 Basic structure of hybrid Neural Network Expert System

在材料设计领域,混合型专家系统可以有效发挥专家系统和神经网络各自的优点,互为补充,使材料数据库的建立更加完善合理,并不断充实,提高材料

的筛选速度,加快新材料的开发。专家系统与神经网络系统于一体在复合材料复杂化研究、原材料选择、结构设计、工艺成型、性能检测等方面具有广阔的应用前景。例如,对于阻燃聚合物配方中作用复杂、机理还不很明确的添加剂,可以采用神经网络的建模方法建立起添加剂对于材料整体性能的网络模型,把这些网络作为专家系统知识表示的内容之一。就能实现传统专家系统的逻辑推理和神经网络的不精确、模糊、直觉推理在形式上的统一^[31]。程羽等^[32]采用基于神经网络的专家系统,建立了颗粒增强金属基复合材料的本构方程。以热模拟试验得到的试验数据作为训练样本,比较准确地实现了工艺参数与流动应力之间关系的预测。实验证明此系统具有良好的知识获取能力和推理能力并具有良好的实用性和正确性。

5 结语

通过对复合材料的设计和优化的研究,有效地辅助和指导试验人员进行方案设计,经济地、科学地安排试验,以改进材料的研制流程,缩短材料的研制时间,进而部分地或全部地替代既耗资又费时的复杂实验过程,节省人力物力,进而可以将这种设计方式扩展到实际复合材料领域的工业化实现中去。神经网络和专家系统人工智能方法将对材料从“定性化”研究发展到“量化”研究提供有益的启示,不仅对材料学研究具有重要意义,而且可能引导出复合材料设计方面的新想法。

由于复合材料的复杂性,致使复合材料的设计和优化比对大多数其他材料更加复杂。它又对材料设计和优化提出了挑战性的课题。利用人工智能方法进行材料优化设计经过近20年的发展,目前还有许多问题需要深入探讨和研究。

本文内容虽然仅涉及复合材料设计的模式识别和神经网络方法,但此方法推广应用于其它材料科学中也是可行的,今后,有关人工智能理论进行复合材料的设计和优化的研究有两个发展方向:一是针对实际课题选择合理的方法得到更精确的设计模型;二是期待更加合理而精确的优化模型方法。当然,用智能方法来进行材料设计的研究毕竟不能取代传统的实验研究,理论和实验方法两者相结合必将是未来材料设计的发展道路。

参考文献

- 1 Ricardson M, Polymer W. Engineering composites London: Applied Science Publishers Ltd, 1977
- 2 师昌绪. 材料大词典. 北京:化学工业出版社, 1994
- 3 沃丁柱. 复合材料大全. 北京:化学工业出版社, 2000
- 4 黄伯云, 肖鹏, 陈康华. 复合材料研究新进展. 金属世宇航材料工艺 2008年 第4期

界, 2007; (2): 16 ~ 18

- 5 谢佑卿,唐仁政,卢安贤等. 材料设计的回顾与思考. 材料导报, 1995; (2): 1 ~ 7
- 6 熊家炯. 材料设计. 天津:天津大学出版社, 2000
- 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 ~ 60
- 8 Chen Nianyi, Lu Wencong, Chen Ruiliang et al. Chemometric methods applied to industrial optimization and materials optimal design. Chemometrics and Intelligent Laboratory System, 1999; 45: 329 ~ 333
- 9 刘刚. 材料设计专家系统 KDPAG的原理、构成及应用. 上海:中国科学院上海冶金研究所, 2000
- 10 Zhao Weixiang, Chen Dezhao, Hu Shangxu. Optimizing operating conditions based on ANN and modified GAs. Computers and Chemical Engineering, 2000; 24(1): 61 ~ 65
- 11 韩力群. 人工神经网络理论、设计及应用. 北京:化学工业出版社, 2002
- 12 Muler B, Reinhardt J. Neural Networks. Berlin: Springer-Verlag Press, 1990
- 13 Fayyad U, Stolorz P. Data mining and KDD: promise and challenges. Future Generation Computer Systems, 1997; 13: 99 ~ 115
- 14 袁曾任. 人工神经网络及应用. 北京:清华大学出版社, 2002
- 15 徐建林,王智平. 材料设计中的BP神经网络技术. 宇航材料工艺, 2003; 33(2): 22 ~ 25
- 16 杨榛,顾幸生,梁晓恽等. 基于RBF神经网络的添加剂改性炭材料高温黏结剂的性能预报模型. 新型炭材料, 2007; 22(4): 349 ~ 354
- 17 陈宏星,陈小琳,石银明. 运用神经网络识别复合材料板刚度. 复合材料学报, 2000; 17(1): 108 ~ 110
- 18 樊宁,高子辉,艾兴. 人工神经网络在 $Al_2O_3/TC/SC$ 多相陶瓷刀具材料开发中的应用. 陶瓷学报, 2004; 25(3): 193 ~ 197
- 19 甄强,李文超. 人工神经网络在 $O^2-Sialon-BN$ 复合材料设计中的应用. 北京科技大学学报, 1999; 21(4): 171 ~ 174
- 20 Taylor K K, Darsey J A. Prediction of the electronic

properties of polymers using artificial neural networks. Polymer Preprints, 2000; 41(1): 331 ~ 332

- 21 Feigenbaum E A, Buchanan B G, Sutherland G L. Applications of artificial intelligence for chemical inference. Organic Mass Spectrometry, 1970; 4(1): 493 ~ 501
- 22 Mamalis A G, Grabchenko A I, Fedorovich A I. Development of an expert system of diamond grinding of superhard polycrystalline materials considering grinding wheel relief. Advanced Manufacturing Technology, 2001; 17(7): 498 ~ 508
- 23 Bryzgalin G I, Tsvetkov D I, Kartashov G G. Evaluation of the quality of laminated metallic materials on the basis of high-frequency endurance and damping capacity. Strength of Materials, 1989; 21(12): 1652 ~ 1659
- 24 Ciriscoli P K, Springer G S, Wang Q. An expert system for controlling autoclave temperature in tomorrow's materials today. In: Proceedings of the 34th International SAMPE Symposium. Reno, NY: 1989: 205 ~ 219
- 25 蔡自兴. 智能控制. 北京:国防工业出版社, 1998
- 26 Eric C S. Ceramic Industry, 1993; 11(5): 383 ~ 386
- 27 Vicfor S K, Brown D C. Design methods and techniques applications of artificial intelligence in engineering. Computational mechanics, 1993: 183 ~ 196
- 28 陆文聪,朱兴文,阎立诚. PVPEC: PTC和V-PTC材料优化设计专家系统. 计算机与应用化学, 1993; 13(1): 39 ~ 43
- 29 赵秀阳,刘希民,梁立新. 陶瓷基复合材料 ($Fe_3Al/A_1_2O_3$) 设计专家系统原型的研究与实现. 山东轻工业学院学报, 2003; 17(4): 56 ~ 59
- 30 张家泰,刘慧丰,李庆芬. 压电复合材料设计专家系统的原型设计. 哈尔滨工程大学学报, 1997; 18(5): 49 ~ 58
- 31 夏军涛. 聚合物阻燃材料设计专家系统 FRES2.0的设计和 应用研究. 北京:北京理工大学出版社, 2001
- 32 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 ~ 113

(编辑 吴坚)