

基于神经网络的固体推进剂专家系统研究

封锋, 陈军, 郑亚

南京理工大学机械工程学院, 江苏南京 (210094)

E-mail: nust203@yahoo.cn

摘 要: 固体推进剂研究对航天工业及武器研制具有重要的战略意义。鉴于其研制手段多以实验为主和分析软件智能化程度不高等因素, 提出了基于神经网络的固体推进剂专家系统“SPES”。神经网络可以较好的映射固体推进剂组成、结构及性能之间的复杂关系, 因此 SPES 是基于材料设计思想和配方实例的高精度配方设计及性能预示软件。文中详细阐述了系统设计思想、总体结构、系统功能、关键技术及应用示例等方面。最后对 SPES 实现固体推进剂领域自动化和智能化给予了展望。

关键词: 固体推进剂; 性能预示; 配方设计; 神经网络; 专家系统

中图分类号: TJ55

1. 引言

随着现代战争对武器系统在远程化、机动性等方面的要求越来越高, 因此高性能固体推进剂一直是世界各军事强国竞相研究的热点, 直接影响到航空航天和军事技术的发展。20 世纪 80 年代末和 90 年代初国内外进行了固体推进剂计算机辅助研究方面的探索, 初步形成了固体推进剂性能预示和配方设计的专家系统。美国已拥有既有经验推理能力、又有理论模拟能力的固体推进剂配方设计专家系统。俄罗斯的固体推进剂性能模拟工作细致、全面。荷兰也开发出能模拟固体推进剂多种性能的计算机软件系统^[6]。国内在固体推进剂配方设计和性能预示方面, 主要集中在推进剂单项性能的性能预示上, 如“丁羟推进剂配方计算机辅助设计系统”, 它能综合考虑能量、燃速和力学性能指标, 进行配方自动优化设计^[1]。

我国高性能固体推进剂的研制进展很快, 但研制手段和分析软件仍然落后, 迫切需要开发先进的、高精度的固体推进剂性能预示与配方设计软件, 以期缩短固体推进剂的研制周期, 减少重复实验、节约研制成本。固体推进剂组成、结构及性能之间的关系还不十分清楚, 其配方设计缺乏合适的理论指导和切实可行的经验模型。一种推进剂新配方的设计仍需反复试验, 效率很低。鉴于以上原因, 根据材料设计思想, 结合固体推进剂研制的具体实例, 提出了基于神经网络的固体推进剂专家系统^[2-4]。系统开发的目的, 正是在固体推进剂设计经验比较丰富, 而理论知识相对匮乏的情况下, 结合开发实例和提炼专家知识, 建立固体推进剂配方设计实例库和知识库, 并在此基础上模拟专家开发、设计固体推进剂的思路和方法的专家系统, 以期对固体推进剂新配方设计做出指导和辅助, 从而促进固体推进剂的研究与开发。

2. 固体推进剂专家系统(SPES)

专家系统(Expert System, ES)是一个具有专门知识的程序系统, 根据一个或多个领域专家提供的专门知识进行推理, 模拟人类专家做决策的过程来解决那些需要专家才能解决的复杂问题, 是人工智能理论(AI)的一个重要应用。目前, 专家系统已在农业、医学、化工及材料领域中得到广泛应用^[6-12]。

固体推进剂的研制具有知识和经验丰富的领域专家, 并且有大量的配方实例得到应用。同时其性能预示及配方设计需要查询各类信息, 进行各种形式可能的逻辑推理, 这些为借助于计算机优势建立专家系统提供了必要条件和设计框架。

2.1 SPES 设计思想

SPES 模拟专家开发新配方的思路, 确定专家系统进行配方设计的过程: (1) 根据固体推进剂配方组元和设计要求, 对配方实例库进行查询相似度较高的配方实例, 根据规则选择其中最符合要求的配方实例; (2) 如果查询成功, 系统以该配方实例为参考提供设计方案, 然后将设计方案中的参数输入人工神经网络预测模型进行性能预测; (3) 若预测结果符合要求则输出设计方案, 否则调整方案设计参数直到符合要求再输出设计方案; (4) 如果查询不成功, 则利用配方知识库中有关组成、结构及性能关系的经验规则或理论预示模型, 通过推理或计算给出初步的配方设计方案; (5) 将第 4 步给出的初步配方方案参数输入人工神经网络进行性能预测, 最后输出合适的设计方案。

SPES 具有一个巨大的知识库、数据库及较为复杂的系统结构。因此, 首先选择某些成熟的固体推进剂种类的局部设计过程作为基点, 并有针对性的建立小型专家系统, 调试成功后, 再对专家系统进行逐步扩充。初始时赋予专家系统机器学习, 到专家系统成熟后改为机器学习和神经网络学习相结合, 使系统最终成为具有较高智能水平的神经网络专家系统。系统的开发用面向对象程序设计 Visual C++编写, 数据库系统采用 Microsoft Access。

2.2 SPES 总体结构

SPES 采用模块化结构, 主要包括人机界面、主控模块、配方设计模块、效果预测模块、参数优化模块、解释系统、学习模块、数据库管理系统等几大部分, 用户可以方便对系统进行查询、编辑等。SPES 总体结构框图如图 1 所示。

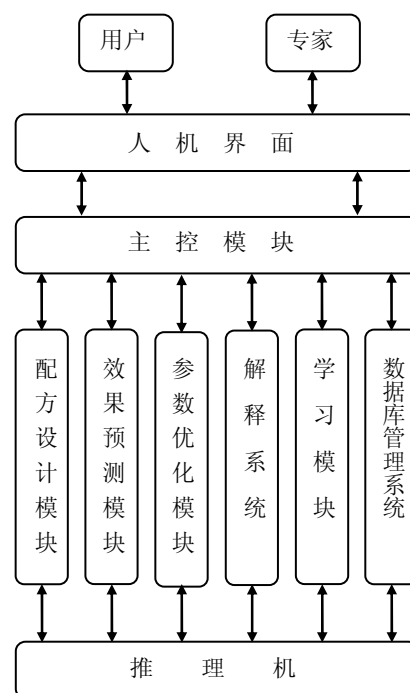


图 1 固体推进剂专家系统总体结构框图

2.3 SPES 系统功能

SPES 可以针对用户给出的设计条件, 选择不同的推理路径, 通过部分的人机对话, 推理式地完成固体推进剂的最优配方方案, 提供组分参数和试验方案。方案的结果有用户参与综合评判。用户满意后, 系统自动保存结果, 起到机器学习的功能。对不满意的结果, 系统

可用参数优化模块或人工调整参数等模式进行调整,直到满意。若始终不满意,可通过理论预测模型进行计算给出初步设计方案,再经神经网络进行预示或以失败处理。

人机界面:该模块是用户与该系统进行信息交流的主要通道。一方面用户在此向系统提供设计的初始条件和要求,回答系统的提问,做出选择等。另一方面系统运行的结果和对运行过程的解释也在此反应给用户,实现用户和系统的双向交流。为方便操作和便于系统理解,这里输入输出都按固定的格式进行。

主控模块:该模块为系统控制模块,完成任务的分解与转移,在较高层次上向用户提供操作选择。

配方设计模块:配方设计是 SPES 的主要功能之一,对于特定的配方,将其组分含量输入专家系统,通过系统建立的知识库和推理机完成从初步到最优设计。该模块包括类比设计、经验设计及理论预示三个子模块。其中,类比设计模式如图 2 所示。

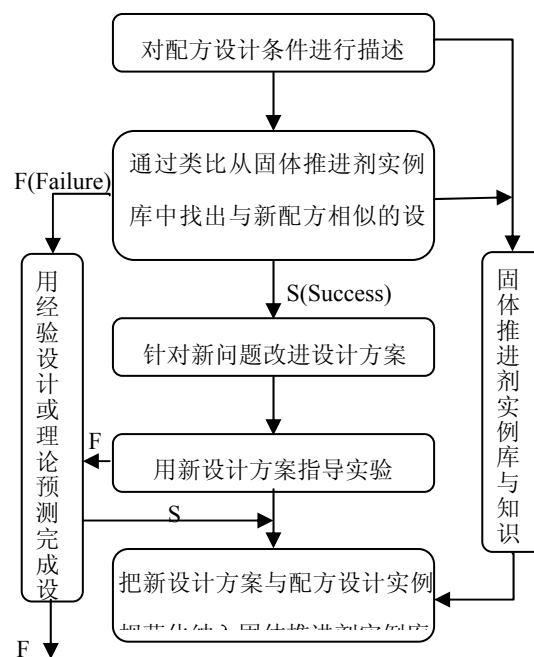


图 2 类比设计的系统模式

效果预测模块:通过神经网络模型揭示固体推进剂配方多设计参数和多设计效果的内在规律性,是检验设计方案的是否可行的有效手段,同时可以有效地减少实验验证的次数。

参数优化模块:该模块是固体推进剂配方设计的咨询模块,当固体推进剂配方设计过程中出现问题或性能上达不到要求时,用户可以将问题输入,系统会应用知识库中的诊断规则,通过反向推理给出产生该问题的原因,对参数调整提出建议,用户根据系统提供的解释调整设计参数,使设计方案得到优化。

推理机:系统的推理过程就是知识的重组和应用过程,根据知识的驱动形式分为数据库驱动的正向推理、目标驱动的反向推理及数据库与目标共同驱动的混合推理。SPES 系统中固体推进剂经验设计模块中采用正向推理,参数优化模块中采用反向推理,“测试—反馈—修正—测试”过程中采用混合推理。其中,经验设计的推理流程如图 3 所示。

学习模块:系统的学习过程就是知识的获取过程,是专家系统中不可缺少的组成部分。学习系统与环境相互作用,不断积累系统所拥有的知识,目的是使系统的工作能够具有更高的智能水平。SPES 的学习过程包括机器学习和人工神经网络的自学习过程。

解释模块：解释功能是专家系统的重要特征，该系统向用户提供运行和所得结论的动态结论的跟踪说明，告诉用户结论是如何得到的，采用了哪些规则等，使系统具有透明性。

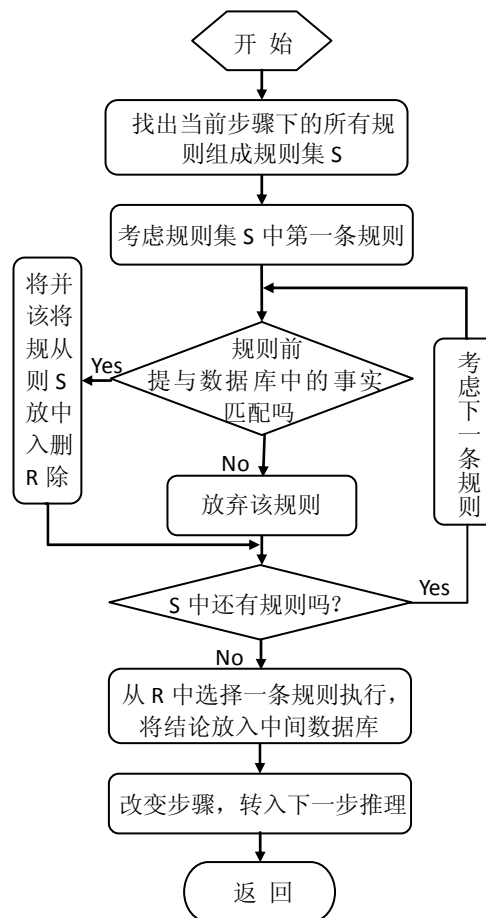


图 3 经验设计的推理流程图

数据库管理模块：系统的数据库管理模块包含了固体推进剂的规则库、实例库、综合数据库(中间数据库)。数据库管理模块不但可以进行静态数据库操作，还可以在系统运行过程中进行动态的数据交互。数据库中的数据的积累和数据结构的合理性是整个专家系统能否有效运行的基础，该模块组成如图 4 所示。

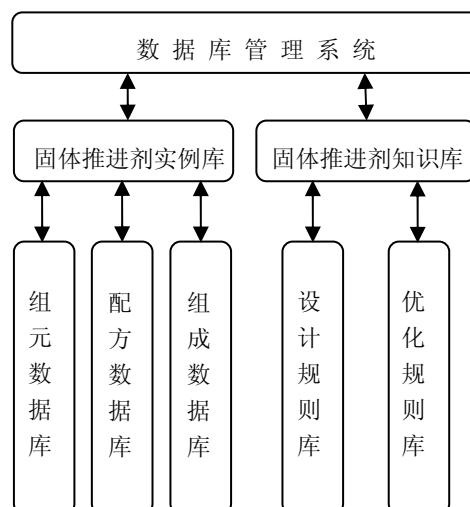


图 4 数据库管理模块的组成

3. SPES 关键技术

SPES 除了具有一般专家系统的思维特征外, 还有明显的设计型及预测型专家系统思维特征。因此, SPES 是集实例库、推理机、预测、优化及解释功能于一体的耦合系统, 并存在以下关键技术:

- (1) 神经网络专家系统的构成: 在人工神经网络与专家系统基本原理与方法的基础上, 建立人工神经网络专家系统的方法, 确定了人工神经网络专家系统的总体框架;
- (2) 固体推进剂数据库的建立: 根据固体推进剂领域知识的和系统推理的需要, 确定数据库的开发工具、数据结构和数据库的组成形式;
- (3) 类比设计、经验设计及理论预示: 在对比学习原理深入了解的基础上, 对固体推进剂配方设计中的类比方法进行深入分析, 确定类比设计的相似准则并建立类比设计模块; 分析固体推进剂研制的思维过程和实际经验, 将固体推进剂开发过程概念化、规则化及模型化, 并在此基础上建立经验设计模块; 在类比设计和经验设计均达不到设计要求的情况下, 建立基于配方组元的固体推进剂性能预示模块。
- (4) 神经网络及其模型: 通过前面对影响固体推进剂研制各因素的分析, 利用人工神经网络中的多层前馈网络模型及其反传算法, 建立多影响因素、多输出指标的配方设计效果预测模型, 同时也是固体推进剂知识获取的重要方法。

4. SPES 应用示例论

SPES 通常采用配方组分的种类、含量、粒度等参数表征固体推进剂配方。文章以高能固体推进剂为示例, 考虑其燃烧性能主要因素, 采用如下 13 个参数来表征推进剂配方, 并用于神经网络计算。

- (1) 影响燃烧的元素(C、H、O、N、Cl、Al)含量(mol);
- (2) 反应物的总标准生成焓 $\Delta H_m(\text{kJ/mol})$;
- (3) 固体组分的分形维数 D_{AP} 、 D_{Al} 、 D_{RDX} ;
- (4) 固体组分的粒度 d_{AP} 、 d_{Al} 、 $d_{RDX}(\mu\text{m})$ 。

上述表征参数可较全面反映 NEPE 类高能固体推进剂配方组分的本质特征, 可通过由少数几种组分组成的简单配方建立的训练样本, 对神经网络进行训练, 来实现对大多数 NEPE 类配方燃烧性能的预测, 从而在一定意义上实现了神经网络的“外推”预测。

5. SPES 前景

专家系统作为人工智能研究领域的一个重要分支, 是人类智能的计算机延续。SPES 作为固体推进剂领域的专家系统, 具有积极的科研意义和较为广阔的应用前景:

- (1) 可以将该领域内不同来源的设计实例汇集和综合起来, 以统一的数据结构存放在数据结构存放在数据库中, 这样既可以是知识系统化, 防止知识的流失, 又可以利用数据库的强大检索功能, 快速向用户提供设计信息;
- (2) 以专家系统推理规则的形式将领域专家分析和解决问题的思维方式模式化, 通过专家系统推理机即通过计算机程序将专家的经验知识存储起来, 对固体推进剂性能预示进行指导, 这样一定程度上减轻对为数不多的配方设计专家的依赖, 便于高性能推进剂的研制开发。
- (3) 人工神经网络和专家系统的结合, 使固体推进剂组成、结构及性能之间的复杂、专家知识难以获取和表达的问题得以解决, 使固体推进剂配方设计具有自学习的功能。

因此, SPES 集计算机专家、固体推进剂领域的诸多专家及文献资料的各项知识和经验于一身, 博采众长, 能提供高质量的服务, 比单一的专家有更高的可信度, SPES 缩短了固体推进剂研制周期, 降低了工作量, 提高了效率, 减少了研究经费, 并为设计出更高性能的固体推进剂提供了可能。

参考文献

- [1] 李一彤, 刘建平, 裴晓华. 数值计算在固体推进剂研制生产过程中的应用[J]. 固体火箭技术, 2003, 26(2): 38-41.
- [2] 张端庆. 固体火箭推进剂[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1991.
- [3] 申同贺, 康德山, 钦佩, 等. 模式识别及应用—配方优化设计系统介绍[J]. 精细化工, 1996, 13(4): 49-51.
- [4] 张海娜, 庞军, 冯伟, 等. 固体推进剂配方与性能数据库的设计[J]. 火炸药学报, 2003, 26(2): 47-49.
- [5] Shaw F J, Fifer R A. Preliminary report in developing an expert system for computer-aided formulation of Propellants [J]. Avail, NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U.S.), 1989, 89(1).
- [6] 冯定. 神经网络专家系统[M]. 北京: 科学出版社, 2006.
- [7] 王亮, 吴波, 何宜丰, 等. 配方性能预示与控制系统的设计与实现[J]. 航天制造技术, 2004(2): 47-49.
- [8] 文歧业. 矿渣微晶玻璃神经网络专家系统应用[D]. 南宁: 广西大学, 2001.6
- [9] 夏军涛, 黄聪明. 聚合物阻燃材料专家系统 FRES2.0 的设计[J]. 计算机与应用化学, 2000, 17(5): 403-460.
- [10] 高威, 王鹏, 李庆芬. 基于 Web 的复合材料设计专家系统[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2004, 25(6): 774-775.
- [11] 李运爽, 武建军, 王福生. 混合型专家系统在材料设计中的应用[J]. 河北工业大学学报, 2005, 34(1): 61-64.
- [12] 张兴昌. 基于神经网络的新学习算法研究及其应用[J]. 控制与决策, 1997, 12(3): 213-216.

Research on Expert System of solid propellants based on Artificial Nerve network

Feng Feng, Chen Jun, Zheng Ya

School of Mechanical Engineering, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing,
PRC (210094)

Abstract

The solid propellant research has the important strategic sense to astronautics industry and the weapon development. Because its development method is as tests primarily and the intellectualized degree of analysis software is not higher, proposed solid propellant expert system based on the nerve network (SPES). The artificial nerve network can reflect the complex relations of the solid propellant composition, the structure and the performance, so the SPES is a high accurate formula design and performance i prediction software based on the material design thought and the formula example. The article elaborated the system design thought, whole structure, system function, essential technology research, Application demonstration and so on. Finally, the forecast to the SPES realization of the solid propellant domain automation and the intellectualization is given.

Keywords: solid propellants; performance prediction; formula design; artificial nerve network; expert system

作者简介: 封锋 (1982—), 博士研究生, 主要从事固体推进剂性能预示研究。