

文章编号: 1006-9941(2014)04-0542-06

基于语义网络的推进剂配方设计知识表示

李志琴¹, 赵宏安¹, 赵凤起², 雷元元¹, 关博通¹, 徐司雨², 牛晓霞¹, 李冠霖¹, 高红旭², 李上文²

(1. 西北大学信息科学与技术学院, 陕西 西安 710127; 2. 西安近代化学研究所燃烧与爆炸技术重点实验室, 陕西 西安 710065)

摘要: 针对构建推进剂配方设计专家系统时, 配方设计知识内容繁多、关系复杂所导致的知识表示困难这一问题, 采用语义网络知识表示方法, 构建推进剂组方知识语义网络体系, 研究该体系在数据库中的存储结构设计, 成功地将内容丰富、关系复杂的推进剂配方设计知识表示为适用于专家系统的知识内容。利用专家系统设计的一则改性双基推进剂配方实例展示了该知识体系在推进剂配方设计专家系统中的运用效果。

关键词: 人工智能理论; 推进剂; 语义网络; 知识表示; 推进剂配方设计

中图分类号: TJ55; TP18

文献标志码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.04.022

1 引言

目前推进剂的配方设计工作是以领域专家的经验知识、结合化学实验完成的, 其中存在成本高、周期长、重复实验次数多等很多缺点, 因此各国都迫切需要开发出先进的计算机辅助配方设计软件。专家系统作为人工智能领域最成熟的技术之一, 是一种在相关领域中具有专家解决问题能力的智能计算机程序系统。它能运用存储在知识库中的大量领域专家水平级的理论及经验知识, 模拟领域专家解决问题的思维过程进行推理判断, 求解那些需要人类专家才能处理的复杂问题^[1-2]。鉴于专家系统的这些特点及推进剂配方设计工作的特点, 可知专家系统适合于推进剂配方设计工作。20世纪80年代末、90年代初, 国内外就进行了固体推进剂计算机辅助研究的探索, 形成了早期的固体推进剂性能预示和配方设计的专家系统。如美国的F J Shaw与R A Fifer研究了计算机辅助火药配方设计专家系统, 并分别在美国弹道研究所技术报告及24届JANNAF燃烧会议上发表^[3-7]。我国航天化学动力技术研究院42所的代表志龙等在中国宇航学会固体火箭推进专业委员会第二十六届年会上发表了关于“固体推进剂配方设计专家系统研究”的研究论文^[8], 南京理工大学陈军等在中国宇航学会固体火箭推进第

22届年会上发表了关于“复合固体推进剂能量特性配方设计专家系统”的研究论文^[9-10]。

设计开发某一领域的专家系统, 解决领域知识的表示问题至关重要。专家系统属于人工智能领域的一个重要分支, 因此这一问题可以从人工智能中的知识工程中寻求答案。在知识工程领域, 现有多种知识表示方法, 如: 有逻辑表示法、产生式规则表示法、语义网络表示法等。语义网络(semantic network)作为人工智能中一种非常有效的知识表示方式, 能很好地表示知识之间的相互关系, 以及各类知识所附属的众多属性^[1-2]。由于改性双基推进剂组方方面的知识是一类涉及到事件间存在特定关系(有指向的)同时又附加多种属性的知识形式, 且这类知识关系往往较为复杂, 由人工智能中的知识表示理论可知, 这类知识难以采用诸如规则、逻辑、或框架等形式表示。因此通过研究、比较语义网络理论与推进剂组方知识特点可知, 推进剂领域知识采用语义网络表示较为理想。

经分析可以得出, 现有文献鲜见采用语义网络表示推进剂配方设计领域知识的报道。因此本研究立足前人的研究成果, 以推进剂配方领域知识采用语义网络形式表示及其采用语义网络表示后的物理存储结构设计为研究对象, 开展了配方设计问题知识化-知识概念化-概念形式化-形式规则化-规则合法化, 即从问题抽象到知识表示的完整过程的深入研究。本研究重点报告推进剂配方设计领域知识的语义网络知识表示及其在计算机中的存储管理、数据结构设计的内容, 以期解决推进剂配方设计领域内容繁多、关系复杂的知识表示及在数据库中的存储难题。

收稿日期: 2013-07-17; 修回日期: 2013-09-18

作者简介: 李志琴(1986-), 女, 硕士研究生, 主要从事计算机应用研究。e-mail: lizq789@126.com

通信联系人: 赵宏安(1958-), 男, 研究员, 主要从事计算机应用研究。e-mail: zhaqye@163.com

2 语义网络的概念

在人工智能研究领域中,问题求解的研究是以知识表示和知识的运用(即推理)为基础的。知识表示是指如何将已获得的知识以计算机内部代码形式语言或类自然语言加以合理地描述、存储(形式存储),以便合理、充分、有效地利用这些知识进行推理。语义网络作为一种知识表示的方式,既可以表示事实性的知识,也可以表示有关事实性知识之间的复杂联系。它将概念及其语义关系用网络图形来表示。语义网络由节点和节点间的有向连线组成,节点表示各种事物、概念、属性、状况等;连线表示各种语义联系,指明其所连接的节点间的各种语义联系;节点均有确定的标识,以便区分各种不同对象,连线也带有表示对象间各种不同关系的标识,如:时间关系(before、after)、位置关系(located-on)、分类关系(ISA)、聚集关系(AKO)等;每个节点可以带有若干属性;节点还可以是一个语义子网络,形成一个多层次的嵌套结构^[11-13]。

3 语义网络在推进剂配方设计中的表示与存储实现

3.1 推进剂配方设计领域知识的语义网络表示

推进剂配方设计过程中涉及到的知识数量相当庞杂,不仅有推进剂配方设计领域中的概念性知识,也有用于改善推进剂能量性能所采取的措施方面的知识、用于提高装药成型工艺过程中安全性方面的控制措施知识等。推进剂配方设计领域知识的形式呈现方式也多样化,如叙述型、逻辑型、图表类、公式类等,并且这些知识间的关系不是简单的逻辑关系,而是错综复杂相互关联的多样化关系:如配方设计知识中存在着成分之间的配伍关系;性能与成分之间的依存关系;工艺与成分之间的约束关系;装药成型工艺与成分配比的关系等等^[14-16]。如此多的关联关系,在众多知识表示形式中除语义网络以外的其他知识表示形式往往无能为力,鉴于语义网络知识表示法不仅能表示出知识概念、概念的附属属性及概念间的联系,也可以很好地表示出将复杂的知识命题划分为若干子命题的层次性知识的特点,可知推进剂配方设计领域知识采用语义网络表示法是不二选择。

为求解改性双基推进剂配方设计命题,可将改性双基推进剂组方方面的知识命题按下述命题管理层次设计,即将复杂命题逐步分解细化成简单的子命题:

顶级命题:推进剂。

一级命题:固体推进剂是推进剂中的一种类型。

二级命题:改性双基推进剂是固体推进剂中的一

种类型。

三级命题:改性双基推进剂的包含功能成分有:粘结剂、增塑剂、辅助增塑剂、含能添加剂、金属燃料、化学安定剂、安全性能改良剂(降或增感剂)、工艺助剂、燃烧催化剂、消焰剂、燃烧稳定剂等。

四级命题:复合型粘结剂、复合型增塑剂、复合型催化剂等复合型功能成分的组分。

五级命题:构成推进剂功能成分的原材料。

六级命题:原材料的理化性质。

依据上述的命题分解,将内容复杂、关联密切的改性双基推进剂组方方面知识命题分解成简单的子命题,然后通过逐步系统化的过程,即问题知识化—知识概念化—概念形式化—形式规则化—规则合法化的完整过程,再结合知识的语义网络表示理论,最终构建配方组方原则知识的语义网络知识体系如图1所示。

3.2 推进剂配方设计领域知识库中语义网络数据存储管理及存储结构设计

从图1可以得知,推进剂配方设计命题求解知识的语义网表示体系是一个异构知识体系,其在计算机中难于采用整齐划一的统一结构来保存,出于节省数据库存储空间,便于灵活、分类管理,兼顾知识匹配效率及兼顾交叉命题求解知识的共享考虑,推进剂配方设计命题求解知识采用语义网络表示的异构知识体系的存储并非被组织在某个单一数据库中,而是将该知识体系安排在不同结构类型的数据库中。在该知识体系中,一级到三级命题的知识采用框架类知识表示(物理存储表示),一些通过调节配方成分及其含量来进行性能调节的操作类知识在数据库中采用规则知识表示形式表示,对于初始设计配方的组方原则性知识、其它改善配方性能的措施类知识及语义网络中的关系等知识寓于框架之中,即采用框架知识表示形式。语义网络前三级关系存储结构如表1所示。

下面以粘结剂体系为例说明语义网络的数据存储结构形式。根据领域专家知识可知一个特定的粘结剂体系通常是由固定搭配的粘结剂+增塑剂(主溶剂)+辅助溶剂组成,用量比例一般也是相对固定的。这里粘结剂与增塑剂之间的固定搭配关系映射到语义网络上就是一个事实(粘结剂)和另一个事实(增塑剂)之间存在的有向关系的具体表现,而把它们的搭配比例等信息看成是这种关系上的附属属性。语义网络上各事件之间的有向关系通过数据记录中的特定关系字段来体现(增塑对象成分名称)。复合增塑剂知识的语义网络采用数据库映射后的存储与关系结构如表2所示。

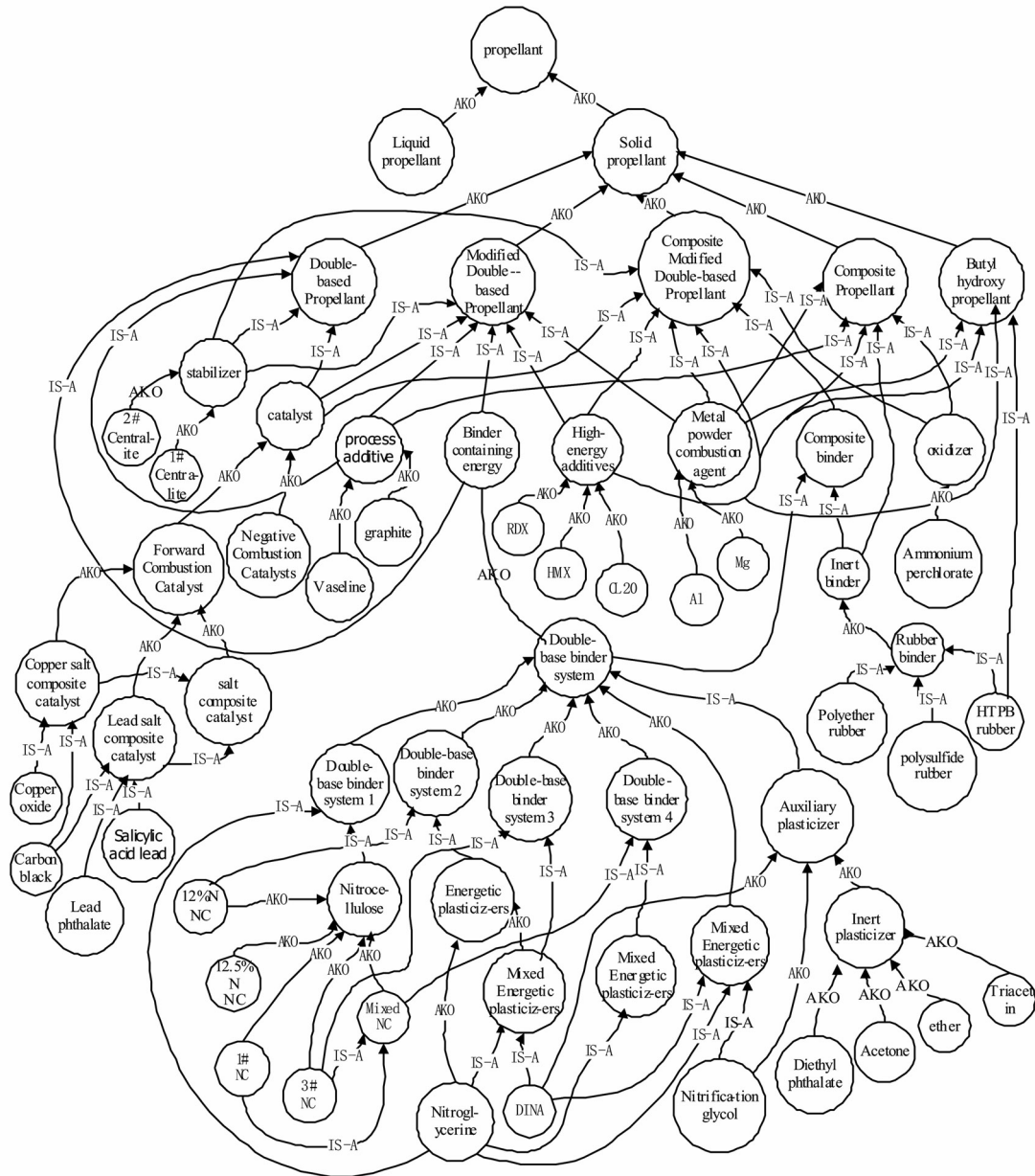


图1 推进剂配方组方原则知识的语义网络知识体系

Fig.1 The knowledge system of semantic network of propellant formula principle knowledge

表1 语义网络中的前三级关系存储结构

Table 1 The first three relations storage structure in the semantic network

| FM_ID | type | num ¹⁾ | first component | second component | third component | forth component | fifth component | sixth component | ²⁾ |
|-------|--|-------------------|-----------------|-------------------------|------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------------|---------------------|
| 1 | single-based propellant | 2 | binder | chemical stabilizer | NULL | NULL | NULL | NULL | |
| 2 | double-based propellant | 4 | binder | solvent and plasticizer | catalyst | chemical stabilizer | NULL | NULL | |
| 3 | modified double-based propellant | 6 | binder | solvent and plasticizer | metal combustion agent | catalyst | chemical stabilizer | Process additives | |
| 4 | composite modified double-based propellant | 8 | binder | solvent and plasticizer | inert binder | oxidizer | metal combustion agent | high-energy elemental powder | |
| 5 | cross linking double-based propellant | 7 | binder | solvent and plasticizer | high-energy elemental powder | metal combustion agent | catalyst | chemical stabilizer | |

Note: 1) The number of functional component; 2) The other functional components.

表 2 复合增塑剂知识语义网络数据库映射的相应存储与关系结构表

Table 2 The structure table of storage and relationship of Compound plasticizers mapping in the database

| ID | plasticized component | mix ratio of plasticizer | main plasticizer | cosolvent 1 | ¹⁾ |
|----|---|--------------------------|------------------|------------------------------|---------------------|
| 1 | 3 [#] nitrocellulose | 1 : 0 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | NULL | |
| 2 | 1 [#] nitrocellulose+3 [#] nitrocellulose | 1 : 0.1 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | dinitroxydiethyl-nitramine | |
| 3 | 1 [#] nitrocellulose+3 [#] nitrocellulose | 1 : 0.2 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | dibutylphthalate | |
| 4 | 1 [#] nitrocellulose+3 [#] nitrocellulose | 1 : 0.2 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | dinitrobenzene | |
| 5 | 1 [#] nitrocellulose+3 [#] nitrocellulose | 1 : 0.2 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | nitration of ethylene glycol | |
| 6 | 1 [#] nitrocellulose+3 [#] nitrocellulose | 1 : 0.2 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | diethyleneglycol -dinitrate | |
| 7 | 3 [#] nitrocellulose+Polyurethane | 1 : 0.2 : 0 : 0 : 0 : 0 | nitroglycerine | three coarse-fine | |

Note: 1) other cosolvents.

按照上述方法,将推进剂领域语义网知识体系中的其他知识存储在数据库中,最终即可实现推进剂领域知识在计算机中的存储,可供专家系统后续使用。

4 推进剂语义网知识体系的运用效果及分析

推进剂的组方知识采用上述方法表示与存储后,可以灵活地被用于推进剂配方设计中。现设定一套合理的改性双基推进剂指标进行测试:能量性能比冲设为 2380 ~ 2510 N · s · kg⁻¹;低特征信号设为无烟或微烟;燃烧特性要求为:在燃烧压力范围 6 ~ 9 MPa 时出现燃速压力平台效应;装药采用螺压成型制作工艺。将以上设计指标输入推进剂配方设计专家系统中,专家系统依据指标在组方知识决策下进行一系列推理,自主完成配方成分的选择及各成分含量的确定。系统对设计配方进行性能预估:若满足指标要求,配方设计结束;若不满足指标要求,系统从知识库中推理出调节性能的措施,对配方进行再设计,直至性能满足指标要求时结束设计,所有的设计轨迹均被记录在解释器中。其设计结果如图 3 所示,图的上半部分是设计出的新配方,下半部分是对配方设计过程的解释。

经分析,由专家系统设计出来的新配方与已测定性能配方库中某配方 I 的能量比冲很接近。二者的成分组成、各成分含量的对比及性能比如表 3、表 4 所示。

由表 3 可知,二者能量的主功能成分组成相同,由硝化棉(13% N)、硝化甘油和吉纳组成,且能量主功能成分的含量构成接近。另外由新配方的成分组成也可以看出,新配方也属于改性双基推进剂,符合设计指标要求的设计类型(设计过程中用到表 1 的知识)。由表 4 可知,由专家系统设计出的新配方经性能预估得出的比冲与配方 I 的已测定比冲相差不大,且二者都是螺压装药工艺。



图 2 专家系统开展配方设计的效果图

Fig.2 Formulation designed by expert system

表 3 新设计配方与某号配方的成分组成及成分含量的对比

Table 3 Comparison of the component and its content of new design formula and formula I

| new design formula | | formula I | |
|--------------------|-----------|--------------------|-----------|
| name | content/% | name ²⁾ | content/% |
| NC-130 | 51.3 | NC-130 | 50.9 |
| NG | 34.2 | NG | 27 |
| DINA | 12.8 | DINA | 12.8 |
| C2 | 1 | C2 | - |
| Graphite | 0.04 | Graphite | - |
| VSL | 0.3 | VSL | - |
| Phthalate Pb | 0.2 | Ta-Pb | - |
| Oxide Cu | 0.1 | Al | 5 |

表 4 新设计配方与配方 I 的性能对比

Table 4 Comparison of the performance of new design formula and formula I

| formula | specific impulse /m · s ⁻¹ | signature | charge process |
|--------------------|---------------------------------------|-----------|---------------------------|
| new design formula | 2442.1 ¹⁾ | no smoke | screw compression process |
| formula I | 2443.9 ²⁾ | smoke | screw compression process |

Note: 1) specific impulse estimated; 2) specific impulse determined.

二者的差异如下: 1) 新配方中没有金属粉。由于配方的设计指标要求为无烟, 专家系统自动设计时在数据库中查询到满足燃烧不产生烟气的知识措施可知, 应避免使用金属作为燃烧剂, 因此最终设计的配方中并没有金属铝粉; 2) 新配方中催化剂成分没有鞣酸铅, 而比配方 I 多了邻苯二甲酸和氧化铜。由于指标要求平台范围是 6~9 MPa, 专家系统通过查询数据库中的知识可知要使压力 6.00~9.00 MPa 的范围出现燃速平台效应, 应在配方中添加平台催化剂, 其成分有邻苯二甲酸铅、氧化铜、炭黑, 并且三者需满足一定的配比关系, 同时由数据库中知识也可知鞣酸铅并非该压力范围下的催化剂, 因此新配方中并没有配方 I 的鞣酸铅成分。3) 虽然新配方与配方 I 在小含量成分上存在一定的差异, 但这不会对其能量性能造成很大影响。因此可知, 推进剂配方设计专家系统在知识的主导下设计出的配方是合理的。

推进剂配方设计专家系统利用知识库中的组方知识及关于功能成分遴选、添加、剔除、更换, 成分含量调整等配方设计措施以及减小性能偏差所应采取的措施, 最终设计出符合性能指标要求的配方。实验表明采用本研究的知识表示及存储方法构建的知识体系能够有效支持专家系统开展合理、有效的配方设计工作。

5 结 论

(1) 采用语义网络表示法构建了推进剂配方设计领域知识的语义网络知识体系。该知识体系能有效地表示推进剂配方组方原则性知识中的概念及概念间的关联关系。

(2) 推进剂配方设计命题求解的语义网表示体系在数据库中数据结构设计及其存储管理融合了框架知识表示法和其他知识表示法, 形成了混合存储体系。该混合存储体系解决了推进剂配方知识存储及运用的难题。采用这种混合存储体系一方面有利于解决数据存储冗余问题, 另一方面也可以提高问题的求解效率。

(3) 依据推进剂领域知识的语义网络知识体系与其在数据库中的混合存储体系, 配方设计专家系统求解推进剂配方设计问题时, 可以灵活地应用知识体系中的知识, 在知识决策下可以自主设计出符合性能要求的配方, 设计及结果分析表明问题的求解过程近似于人类专家的求解行为, 具有合理的求解问题的思路。

参考文献:

[1] 尹朝庆, 尹皓. 人工智能与专家系统[M]. 北京: 中国水利水电

出版社, 2009.

YIN Chao-qing, Yin Hao. Artificial Intelligence and Expert System [M]. Beijing: China WaterPower Press, 2001.

[2] Michael Negnevitsky. 人工智能系统[M]. 顾力棚, 等译北京: 机械工业出版社, 2007.

Michael Negnevitsky. Artificial Intelligence A Guide to Intelligent System[M]. Gu Li-xu, et al translate. Beijing: China Machine Press, 2001.

[3] Shaw F J, Fifer R A. A preliminary report on developing an expert system for computer-aided formulation of propellants[R]. Army Ballistic Research Lab Aberdeen Proving Ground MD, 1988.

[4] Morris J B, Fifer R A. Report on Using Expert Systems for Computer-Aided Formulation and Property Estimation of Propellants. 1. Expert System Shell Selection and Initial Package Design[R]. Army Ballistic Research Lab Aberdeen Proving Ground MD, 1991.

[5] Shaw F J, Fifer R A. An Expert System for Computer-Aided Design in Propellant Formulations [C] // Proceedings of 24th JANNAF combustion meeting, CPIA. Pub. 1987.

[6] Morris J B, Fifer R A. An Expert System/CAD Package for Propellant Formulation and Property Estimation [R]. 27th JANNAF Combustion Subcommittee Meeting, 1990, 1: 197-206

[7] Morris J B, Pesce-Rodriguez R A. Development of Expert System and Neural Networks in Analytical Chemistry[J]. *Intelligent Instruments & Computers*, 1991, 9(5): 167-75.

[8] 代志龙, 郑剑, 郭翔. 固体推进剂配方设计专家系统研究[C] // 中国宇航学会固体火箭推进专业委员会第 26 届年会论文集(推进剂分册), 2009.

DAI Zhi-long, ZHENG Jian, GUO Xiang. Research on the propellant formula design expert system of solid propellants[C] // Chinese Society of Astronautics solid rocket propulsion Committee of the 26th Annual Meeting Proceedings (propellant volumes), 2009.

[9] 封峰, 陈军, 郑亚. 固体推进剂专家系统总体研究[J]. 南京理工大学学报, 2009, 33(2): 247-251

FENG Feng, CHEN Jun, ZHENG Ya. Whole research on expert system of solid propellants[J]. *Journal of Nanjing University of Science and Technology (Natural Science)*, 2009, 33(2): 247-251.

[10] 陈军, 王栋. 复合固体推进剂能量特性配方设计专家系统[C] // 第 22 届中国宇航学会固体火箭推进年会(推进剂分册), 2005. CHEN Jun, WANG Dong. Energy characteristics of composite solid propellant formulation design expert system[C] // Chinese Society of Astronautics 22nd Annual Meeting of the solid rocket propulsion (propellants Volume). 2005

[11] 李洁, 丁颖. 语义网关键技术概述[J]. 计算机工程与设计, 2007, 28(8): 1831-1836.

LI Jie, DING Ying. Survey of semantic web key techniques[J]. *Computer Engineering and Design*, 2007, 28(8): 1831-1833.

[12] 孔为民, 涂中群. 语义网的技术及其应用[J]. 农业图书情报学刊, 2010, 22(1): 54-56.

KONG Wei-min, TU Zhong-qun. Semantic web technology and its application[J]. *Journal of Library and Information Sciences in Agriculture*, 2010, 22(1): 54-56.

[13] 高雪霞, 田文强. 基于语义网的网络智能导航系统研究[J]. 科技通报, 2012, 28(2): 126-127.

GAO Xue-xia, TIAN Wen-qiang. Based on the semantic web network intelligent navigation system research[J]. *Bulletin of Science and Technology*, 2012, 28(2): 126-127.

- [14] 李凤生, 郭效德, 刘冠鹏, 等. 新型火药设计与制造[M]. 北京: 国防工业出版社. 2008,1.
LI Feng-sheng, GUO Xiao-deng, LIU Guan-peng, et al. Design and Manufacture of Advanced Propellants[M]. Beijing: National Defense Industry Press. 2008,1.
- [15] 田德余, 刘剑洪. 化学推进剂计算能量学[M]. 郑州: 河南科学技术出版社,1999,12.
- TIAN De-yu, LIU Jian-hong. Chemical propellants calculated energetics[M]. Zheng Zhou: Henan Science and Technology Press,1999,12.
- [16] 张续柱. 双基火药[M]. 北京: 北京理工大学出版社. 1997,7.
ZHANG Xu-zhu. Double-based Propellants[M]. Beijing: Beijing Institute of Press. 1997,7.

Knowledge Representation of Propellant Formula Design Based on Semantic Network

LI Zhi-qin¹, ZHAO Hong-an¹, ZHAO Feng-qi², LEI Yuan-yuan¹, GUAN Bo-fong¹, XU Si-yu², NIU Xiao-xia¹, LI Guan-lin¹, GAO Hong-xu², LI Shang-wen²

(1. Xi'an NorthWest University, Xi'an 710127, China; 2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: Semantic network knowledge representation method was used to set up a semantic network system for propellant formula knowledge and to study the structure of this system stored in the database. The knowledge of propellant formulation design with rich contents and complex relationship was expressed successfully as the knowledge content applying to expert system. A modified double-based propellant formula example designed by the expert system shows the effect of using the knowledge system in the propellant formula design expert system.

Key words: artificial intelligence theory; propellant; semantic network; knowledge representation; propellant formula design

CLC number: TJ55; TP18

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.04.022