

数据库专家系统与材料设计

姜 作 义

摘 要

数据库专家系统是借助数学方法将专家的知识 and 经验加以提炼,使计算机智能化的产物。利用专家系统进行材料设计是通常所说的计算机辅助设计(CAD)的一个分支。本文就材料设计的基本概念、主要程序进行了介绍,并对如何开展材料研究提出了设想和建议。

众所周知,信息与粮食、能源、资源、材料并列,成为现代社会的支柱。高度信息化的国家,把信息视为仅次于粮食和能源的重要资源。数据库(DATA BASE)是指为便于用计算机进行检索和处理而按一定的结构整理的数据集合体。自1953年数据库概念在美国诞生以来,特别是近十年来,各国数据库的建立如同雨后春笋。科学技术是国家现代化的关键,科学数据库的发展更是极为迅速。科学数据库系统是进一步建立一些决策系统和专家系统、进行人工智能研究的基础。在当今计算机和信息的时代里,善于利用数据库进行准确的信息分析,是领导机关决策的依据。

材料数据库是一类重要的科学数据库。本文着重于数据库专家系统及其应用——材料设计。

数据库专家系统

顾名思义,所谓专家系统是借助数学方法将专家的知识 and 经验加以提炼、使计算机智能化的产物。数据库专家系统可高效地部分代替研究工作者的工作,它可根据前人或他人的知识、经验,进行判断,得出可能的结论意见,现存的知识和经验越丰富,就能得出越准确的结论。当然,符合客观规律的数学模拟表达式的建立是专家系统成败的关键。目前这类专家系统已不乏其例,利用计算机的中医系统、酒的配方系统、烹饪系统等等都是,这些专家系统分别可以根据患者的病情诊病、开出药方;根据需要调配酒的品质;可以设计出新的菜谱

等。

材料数据库专家系统的建立必须以材料数据库为基础。1984年7月成立的航空部材料数据中心所研制的数据库管理系统于1986年通过航空部鉴定,同时又通过编写《中国航空材料手册》及数据写作网,收集了航空用各类材料约2000个牌号近200万数据。并在材料设计专家系统方面进行初步尝试。为数据库专家系统的建立打下了物质基础。

利用专家系统进行材料设计

利用电子计算机进行辅助设计,简称CAD是近年来国际上发展起来的新型设计方法。本文所说的材料设计是CAD的一种,是根据指定的目标性能来确定材料的成分或组织结构。利用数据库专家系统进行材料设计的基本过程:首先是由用户提出所要设计材料的目标性能。其次,计算机在数据库中寻找或“思考”出一个或几个可能符合要求的材料配方(组成或结构)。第三,用户进行挑选,挑选中可随时追加限制条件,直至找到最理想的配方。当然,最终确定配方还必须进行试验评定、试用以及正式使用的考验。利用专家系统进行材料设计、开发新材料的基本流程见图1。

图1中虚线框内部分的工作是由计算机来完成的。计算机完成这个过程非常迅速,在目标值键入后几秒钟内即可完成。并能提供可能的材料配方最佳方案,将节省大量人力、物力和财力,经济效益十分显著。

利用电子计算机进行材料设计的理论基础

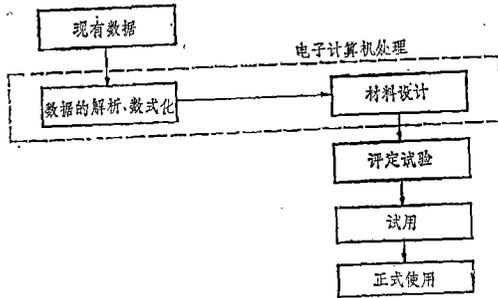


图 1 材料设计流程图

是在于材料性能—组织结构—成分及其加工经历相互间内在的联系，以及这种内在联系的可数学表达性。材料设计的根本任务是提出具有目标性能的材料。材料的性能取决于其组织结构，而材料的组织结构不仅与材料成分有关，还与其所经历的加工（铸造、压力加工、热处理等）密切相关。

完整的成套数据是材料设计的必要前提。设计新材料是在现有知识基础上进行的，现有的知识不仅要丰富，而且必须齐全。这里应该特别指出，采集数据信息时，不论成功的还是“失败的”，只要是可靠的就应采集。要注重研制过程的中间数据。如金属材料，各种元素及含量对组织结构以致性能的影响，不同热处理制度等加工条件对性能的影响及相应的组织结构。再如透明材料，应采集树脂分子量分布、添加剂种类及含量、成形工艺及后处理、相应的组织结构等成套数据。又如胶粘剂，对于既定的树脂—固化剂体系，树脂的比例、固化剂及增韧剂等其它添加剂的含量对胶粘剂本体（树脂浇注体）及胶接性能的影响，胶接表面处理、底胶及偶联剂对胶接性能的影响、相应的组织结构等等应同时一并采集。

现存数据的解析与数学模拟是材料设计的关键。有了上述不同的成分含量、加工条件、组织结构及材料性能的全套数据，进一步工作是进行数学处理，找出性能与结构、结构与成分及加工的内在联系，建立相应的数模方程式。

下面以某Ni基高温合金设计为例，说明利

用数据库专家系统进行材料设计的步骤。图2给出该合金设计框图。图3表明设计所得合金与现有合金的性能对比。

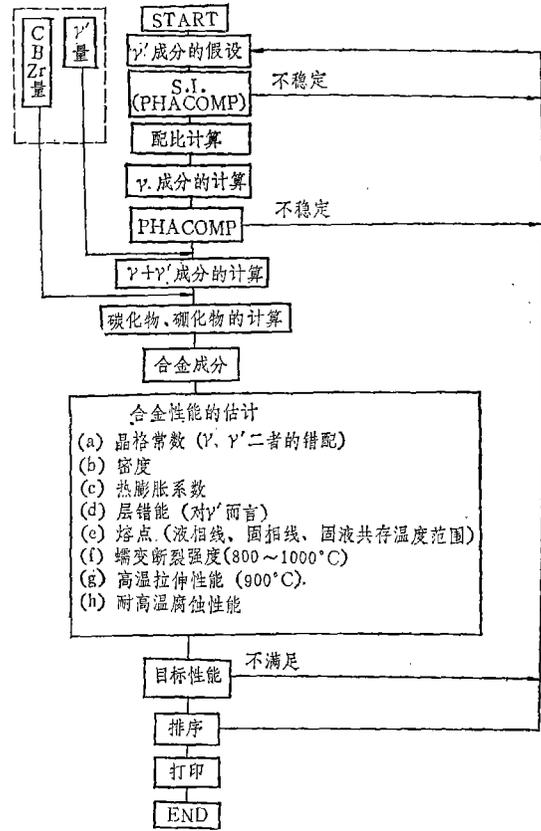


图 2 Ni基高温合金设计流程图^[11]

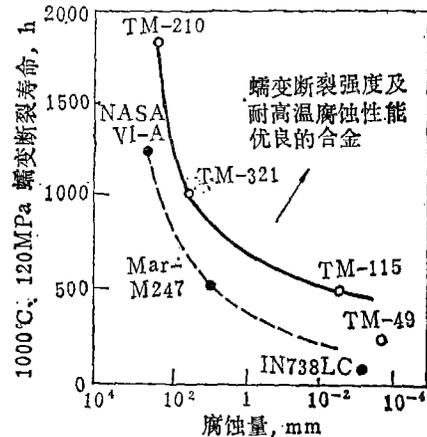


图 3 开发合金与现有合金性能对比^[11]

注：腐蚀量系指在 Na_2SO_4 -25% NaCl 中 900°C 20h试验条件下

加速专家系统设计 努力开展材料设计

由上述可知,利用计算机进行材料设计既高效、经济,又切实可行,应该尽快引入我们的材料科研中。那种“炒菜”定材料的方法是不经济的,不一定是最有效的。但是,目前采用计算机进行材料设计方面还存在一定困难,这主要表现在现存数据不配套,如材料性能缺组织结构信息,或者热处理的制度不明,甚至连炉批次都未作记载。某些材料的性能也过于简单、单纯,限于所谓 σ_b 、 $\sigma_{0.2}$ 、 a_k 、 δ 、 ψ 五大指标,各种重要的使用性能,如疲劳、断裂、腐蚀性能等没有提供,以致不能从这些材料数据中萃取更多有价值的信息。解决数据的配套与性能的综合已成为利用计算机进行材料设计的当务之急。为此,提出以下建议:

(1)为了充分有效地利用现有数据资源,为专家系统提供更多信息,应对不完善、缺项的数据进行必要的补充,补充了小部分,可利用

* * * * *

粉末冶金的新动向

粉末的特性可通过合金的可硬化能力、颗粒的形状和可压缩性来影响零件强度与功能。最近,在基体合金方面已出现了许多变化。由于汽车工业不断强调减轻重量,所以在许多应用方面都以铝取代铸铁。这类零件大多是运动件和摩擦件。为克服铝的耐磨性差这一问题,常在关键的摩擦部位涂复一层价格较贵的耐磨合金,其余部位则用铝。如丰田汽车内燃机中的凸轮轴,就是以4140管材做主轴,再以粉末冶金方法将Fe-Cr-Mo-Cu-P-C合金粉末在其上压出八个凸轮,烧结后即可加工使用。其它如发动机连杆、活塞环、阀座等,也都采用粉末冶金件,并即将被福特汽车装机使用。

从设计角度说,这些零件应具备强度、韧性、冲击韧性的良好搭配。但粉末制品的韧性不如锻造件的好,所以在新合金粉末的研制中

一大批,

(2)特别要把研制过程中的数据、包括技术档案和个人保存的试验数据输入数据库。这将是一批不小的财富;

(3)有计划、有步骤地产生一批综合、配套的数据。可以从飞机、发动机关键零部件材料的开发入手;

(4)为了开展关键性金属结构材料的设计,有必要配备小型熔炼设备(如5~10kg熔炉等),为计算机设计材料的验证试验提供试料,为建立精确的数学模型提供物质条件。

材料方面的计算机辅助设计,在我国还是一个崭新的领域,国内尚无可借鉴。作者撰写此文,期望引起有关领导的重视和支持,同时希望引起材料科学战线同行的兴趣。我们航材数据库中心愿意和大家一道,为祖国材料科学事业的发展、航空工业的振兴而努力。

参考文献

- [1] 山崎道夫,金属, Vol.53, No.10, 1983, PP.11~15.

* * * * *

应设法弥补,由此产生了Fe-P-C、Fe-P合金。P可改善粉末合金的韧性,因为P的熔点比合金正常的烧结温度低,烧结时零件内的孔洞便被液态相所充填,有利于铁粉颗粒间的扩散粘结,从而提高零件的韧性。

粉末可压实性的任何改进,都会成为粉末冶金制品打开一个新销路的依据。现在,已经能够把所制取的铁粉压成密度为 7.2g/cm^3 的零件,这一密度值已达到Fe理论密度值 7.8g/cm^3 的92%。这类粉末可用于制造磁性零件。

为提高制品的密度,已开发出两种经济而又方便的技术。一、用计算机辅助设计,以掌握二次加压成形时粉末的流动情况;二、借助烧结时的自然收缩达到提高密度的目的。该法已生产出密度为理论值99.9%的传动件。利用自然收缩,还可解决两个配合件组装的问题。

(祝摘译)