

# 金属催化剂分子设计专家系统

金海 蔡云 林敬东 陈鸿博 廖代伟

(厦门大学物理化学研究所, 厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室 厦门 361005)

**摘要:** 用 Visual Basic 5.0 结构化语言实现了气-固界面多相催化反应中金属催化剂分子设计的专家系统。知识库采用了 Access 型动态数据库, 支持多用户和数据的即时更新。链接了可视化数据管理器 VisData, 为知识库提供了添加、修改和查询等强大功能。推理机采用精确计算与模糊选择相结合的方法来确定一个反应所需要的催化剂。利用了面向对象的 Windows 编程方式, 窗口界面非常友好直观和易于使用。而且, 系统安装后, 可脱离 Visual Basic 5.0 独立运行。

**关键词:** 金属催化剂分子设计; 专家系统; 知识库; 推理机; 动态数据库; Visual Basic

中图法分类号: O 643.3, O 23, TQ 015.9

文献标识码: A

文章编号: 1001-4160 (2000) 04-327-330

## Expert System of Molecular Design for Metal Catalysts

JIN Hai CAI Yun LIN Jing-dong CHEN Hong-bo LIAO Dai-wei

(State Key Lab of Phys Chem on Solid Surf, Department of Chemistry, Institute of

Physical Chemistry, Xiamen University, Xiamen 361005)

**Abstract:** The expert system for molecular design of metal catalysts in the heterogeneous catalytic reactions on gas-solid interfaces was programmed using Visual Basic 5.0 structural language. An Access-type dynamic database was employed in the knowledge base, which supported multi-user and the instant update of data. The VisData was linked which provided strong function, such as appending, modification and search etc, to the knowledge base. To determinate a desire catalyst for a catalytic reaction, accurate computation combining with fuzzy selection was adopted in the inference engine. The window interfaces are very friendly and easy using since a windows-type OOD programming method was used. Moreover, after success set up, the expert system can divorced from Visual Basic 5.0 and independently run.

**Key words:** molecular design of metal catalysts expert system, knowledge base, inference engine, dynamic database, Visual Basic

70年代以来, 国内外许多专家、学者<sup>[1-12]</sup>都致力于催化剂分子设计的研究, 力图改变人工调试催化剂的非设计传统方法, 进而大大缩短催化剂的开发时间。然而, 由于缺乏普遍适用的统一催化理论及其数学模型, 要实现一个通用的计算机辅助催化剂分子设计专家系统, 在目前来说, 是极其困难的。我们<sup>[5, 7-12]</sup>针对甲烷氧化偶联 (OCM) 这一国际上热门的催化反应首先开发出了催化剂组分分子设计专家系统 (ESMDC), 但尚存在数据库扩充不方便和工作于 DOS 环境下及界面不如 Windows 来得方便等问题。后又用 Visual C++ 语言设计出了催化剂分子设计的通用数据库专家系统<sup>[9]</sup>实现了数据库的程序无关性, 极大地方便了数据库的扩充与更新, 并设计成 Windows 通用界面, 提高了程序的易用性, 但还存在知识库不能提供多用户支持等问题。最近, 我们用 Visual Basic C++ 语言重新设计了针对气-固界面多相催化反应的金属催化剂分子设计专家系统, 采用了动态数据库技术, 便于扩充, 可自定义知识库规则, 并可支持多用户。

收稿日期: 1999-10-26, 收修改稿日期: 1999-12-14

基金资助: 国家自然科学基金资助项目 (编号: 29773037)

作者简介: 金海, 男, 1976年出生, 籍贯: 辽宁省鞍山市, 大学本科, 化学化工专业, 研究方向: 计算机技术在化学化工中的应用, 导师: 廖代伟  
联系人: 廖代伟

## 1 金属催化剂分子设计专家系统的特点和知识库

本系统采用 Visual Basic 5.0 语言编程, 是一个完全面向 Windows 的应用程序。由于采用了 Access 编写数据库, 除具有一般 Windows 程序的一切功能外, 还具有动态数据交换 (DDE) 功能, 可以自动接受别的应用程序传送过来的数据, 接收端可自动更新。反之, 应用程序也可传送数据给任何运行中的其它应用程序。所以, 本系统适合多用户使用, 允许多用户同时使用、查询和修改同一个数据库。此外, 由于可兼容多种类型的数据库和表, 所以特别适合知识库的丰富。

### 1.1 知识库所采用的动态数据库类型和结构

所采用的 Access 型数据库是一个真正意义上的动态数据库, 可供多人同时使用, 且与用户保持动态链接, 随时把一个用户对数据库的改动反映给其它与数据库相连的用户, 它还支持网络用户的访问。

动态数据库与平铺文件型数据库相比主要优点是: 对于多个记录, 不必多次重复输入相同的数据, 可节省大量的时间; 数据库占居空间比较小, 往往只占平铺文件型数据库所需空间的一小部分, 从而节省系统空间。这样, 与他人共享数据库时, 会便利些, 并可大大减少输入的错误。

数据库是按照一定方式组织并存储信息的集合, 表是数据库的组成单元, 一个数据库是由一个或多个表组成; 每一个表中包含若干记录, 每个记录包含若干个字段。

### 1.2 知识库中的动态数据交换

动态数据交换 (Dynamic Data Exchange, DDE) 是 Microsoft Windows 应用程序之间的一种通讯方式。这种连接所起的作用相当于所连接的应用程序之间的数据交换通道。本系统完全支持 DDE 方式。在 2 个应用程序之间建立的连接类型大致可分为自动、手动和注释 3 种基本形式。自动链接将在所变动的数据发生变化时自动更新到与之连接的另一个应用程序中, 而手动链接是只有当特定的数据发生变化时才进行更新, 注释链接则是当交换的数据发生变化时, 通知与之链接的一个应用程序, 但并不发送实际的数据。本系统采用自动方式, 这样有利于多用户的同时使用和数据的共享。

### 1.3 知识库中的结构化查询

现代的结构化查询语言 (SQL) 已经发展成为一种非常强大的行业标准数据库查询语言。本知识库的 Access 即采用 SQL 来作为其 Jet Database 引擎的标准编程语言, 所使用的 SQL 是 ANSI 标准的一种变形, 这与绝大多数其它的解决方案一样。

知识库的查询分为两组, 这两组分别是用数据定义语言 (DDL) 和数据处理语言 (DML) 来创建的。DDL 查询是定义或改变该数据库的结构, 而 DML 查询则是直接对包含在该数据库中的数据进行操作。这两类的查询都有一些共同的组成元素, 例如: 命令、子句、操作符和集合函数等。在数据库中, DDL 型的查询有 Create、Drop 和 Alter 等命令, 而 DML 型的查询则包括 Select、Insert、Update 和 Delete 等命令。根据其结构和用途, 查询可更进一步地分为 Join、Union 和 Parameters 等几种类型。金属催化剂分子设计专家系统知识库的一个查询由参数说明、控制语句和选项说明等基本结构组成。

### 1.4 知识库的丰富

本系统可通过以下 3 个方式来达到知识库的丰富: (1) 访问其它类型的数据库和表 (如: Foxpro、Excel、Paradox、Btrieve、Foxbase、Dbase 等), (2) 用户可以方便地在一个数据库中修改和添加数据, (3) 利用 Access 型数据库具有的动态链接特性, 用户可以方便地共享他人的数据结果。本系统还通过对对象的链接与嵌入 (OLE) 打包方式嵌入了一个 Visual Basic 5.0 附带的功能强大的小巧程序——可视化数据管理器 (VisData), 使用 VisData 可以实现数据库结构的修改、字段的添加以及删除、查找、移动、排序和过滤等功能。

## 2 金属催化剂分子设计专家系统的推理机

### 2.1 推理的方法

本系统推理机采用精确计算与模糊选择相结合的方法来确定一个反应所需要的催化剂。推理机首先根

据用户输入的数学模式或方程式, 从数据库中选出与设计有关的分子或原子的数据参数, 其中包括电负性、原子半径、熔点、价格等等参数。例如, 使用鲍林公式来计算反应气体与金属的生成热, 其键能由  $D(A-B) = \{D(A-A) + D(B-B)\}/2 + 23(X_A - X_B)^2$  给出, 利用气体与金属的电负性来计算气体在金属上的吸附生成热, 从而衡量气体与金属吸附键的强弱, 初步选择出符合“火山形曲线原理”的金属催化剂。然后, 进一步考虑反应温度、反应压力、是否具有放射性以及元素所在的族等因素, 去除一些计算选择得来的金属催化剂, 保留的金属催化剂进入下一步筛选。并在相同的条件下, 尽量选择价格便宜的金属催化剂。本推理机在最后还是设置了一个比较程序, 把推理得来的催化剂和现在已有的比较成熟的催化剂相比较, 若有较大的差异, 则去掉该种催化剂, 重新选择。若所设计的催化剂是新型的、过去尚未报道的, 则该步自动跳过, 不进行比较。

## 2.2 推理机程序的实现

全部程序采用 Visual Basic 5.0 编写和设计窗口, 在窗口画面上放入一些项目, 即控件, 作为用户交互的接口, 并设计了控件的属性。程序运行的焦点——事件发生时, 程序就会弹出一个菜单。本程序使用了 Variant, integer, long, single, double, string, byte 和 boolean 等变量类型。子程序过程由 Sub 和 End Sub 两个语句框住, 而函数过程则由 Function 及 End Function 语句框住。参数用来提供给过程的取代值, 为过程开始的起点, 但对于子程序过程可以不需要。VB 程序代码表达此过程运行的动作。

# 3 程序的编写结构及安装和使用

## 3.1 程序的编写结构

本程序使用结构化语句来代替以往的非结构化语句, 为适应程序的特殊需要, 自定义了一些函数过程, 以调用方式来运行这些函数, 这类函数称为自定义函数。函数过程的内容定义, 如, 子程序过程的安排, 由各个部分组成的函数过程结构表示为下列形式:

**Function** 函数的名称 (参数 1, 参数 2 ...)

**VB 程序代码**

**End Function**

如要隐藏一个输入控件, 我们可以在窗体程序中输入这个函数内容:

**Function** 输入框

**Text1.Visible = False**

**End Function**

例如, 本程序中使用的部分自定义函数名称和功能有: QC——清除各种输入框中的数据; YC——隐藏设计窗口中的输入框; BJ——比较推理得来的催化剂和已经成熟的催化剂之间的差异; XS——当用户在设计窗口中选择好反应及生成物数目后, 显示相应的输入框; JX——当用户在设计窗口中添好所需数据, 并按下确定键后, 检查输入的方法是否有错误; CW——当系统出现错误时, 通过此函数检查错误出现的原因, 并通过即时窗口给予用户必要的答复; YY——当推理机在用户正常的使用下没有得到最后结果时, 通过此函数检查出现问题的原因, 并给用户必要的答复。通过调用上述函数可以很方便的完成本程序的一些功能, 同时也为以后程序的扩充和优化作好充分的准备。

本程序所使用的窗口 (包括若干个立即窗口), 不但是人机对话的窗口, 而且每个窗口都有一项自己独特的任务。例如, “催化剂设计专家系统”窗口是本系统的主窗口 (即, 主界面), 它有一个操作本系统的菜单栏, 使用 10 个控件; “催化剂设计”窗口是本软件最为重要的部分, 也是控件最多的窗口, 它提供了金属催化剂设计的各种输入框和各种功能, 使用 31 个控件; “金属催化剂性质查询”窗口提供了元素各种性质查询的功能, 除了提供简单方便的查询工具外, 更提供了一个功能强大的数据库工具, 使用 12 个控件; “结果显示”窗口在逻辑机推理结束后把结果显示出来, 有 5 个控件; “请您注意”窗口主要是针对初次使用本系统的用户, 将使用中常常遇到的问题加以说明, 让用户的工作得以顺利的进行, 有 6 个控件; “立即窗口”有若干个, 各使用数个控件, 分别在输入出错、输入完成和清除数据等时给予提示; “欢迎再次使用”窗口当用户退出系统时显示。

### 3.2 系统的使用和安装

本软件在安装之前,各个文件是以压缩形式存放的,其目的主要是减小存放空间和避免病毒感染。安装方法非常简单,插入第一张软盘,在存放文件的目录下找到可执行文件“Setup.exe”并双击,就会进入安装。而后,用户只要根据屏幕提示,完成所需的操作,依次插入随后的软盘,当安装程序顺利结束后会出现窗口提示安装成功。然后,在C盘下建立一个Data的文件夹,把安装目录下的数据库文件拷贝到该文件夹中,就可以使用本软件了。若想中断安装或安装失败,只需在有“退出安装”的窗口中点击一下该按键,就可进入退出安装进程,在退出的最后会出现一个窗口提示用户是否生成“安装日记”,该文件可以帮助用户分析安装失败的原因。程序安装后,可脱离Visual Basic 5.0独立运行。

因为在安装的过程中安装程序已经自动在Windows工具条的“开始”菜单中生成了一个快捷方式,你只需点击“开始”菜单,接着点击“程序”,再点击“催化剂设计专家系统”即可。当然你可以在桌面上生成一个快捷方式,这样使用起来会更方便。

执行了程序后就会出现本系统的主界面窗口,在窗口的上方有一个菜单栏,菜单栏有文件、知识库、打印窗体和帮助文件等菜单。要想打开其中的一个菜单,除了用鼠标点击的方法外,还可以用热键的方式。随后,用户只要根据窗口的提示,仔细阅读各项说明,进行必要的操作或输入必要的数,即可方便地进行所需类型催化剂的分子设计、性质查询与添加和打印等。还可以启动功能强大的数据库操作工具VisData,进行数据的修改、添加和建立各种类型的数据库。若想返回前一窗口进行其它操作,只需点击窗口的“返回上一页”。如果在使用程序时遇到了困难,可使用帮助文件。若不知道某个按键的作用时,只需把鼠标的箭头放在按键上,等1秒左右就会显示出该按键的功能。由于本系统利用了面向对象的Windows编程方式,所以,界面非常友好直观、易于使用。

#### 参 考 文 献

- 1 Trimn D L. Design of Industrial Catalysts. New York: Elsevier Sci, 1980
- 2 廖代伟. 催化剂设计浅谈. 化学通报, 1982, (3): 38, 44-51  
Liao D W. Introduction to catalyst design. Chemistry, 1982 (3): 38, 44-51
- 3 Hegecius L L. Catalyst Design Progress and Perspectives. New York: John Wiley & Sons, 1987
- 4 Graziani M, Rao C N R. Proceedings of the Workshop on Catalyst Design. Advances in Catalyst Design. New Jersey: World Sci Pub, 1991
- 5 Liao D W, Huang Z N, Lin Y Z, Wan H L, Zhang H B, Tsai K R. Computer-aided molecular design of catalysts based on mechanism and structure. J Chem Inf Comput Sci, 1996, 36(6): 1178-1182
- 6 方宁, 孙杰, 江扬波, 易军, 廖代伟. 催化剂分子设计的通用数据库和用户界面. 计算机与应用化学, 1999, 16(2): 105-110  
Fang N, Sun J, Jiang Y B, Yi J, Liao D W. Universal database and user interface for catalyst design. Comput Appl Chem, 1999, 16(2): 105-110
- 7 黄遵楠, 廖代伟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统 ESMDC 及其在甲烷氧化偶联催化剂设计中的应用. 计算机与应用化学, 1994, 13(3): 167-171  
Huang Z N, Liao D W, Zhang H B, Wan H L, Tsai K R. Expert system of molecular design of catalyst (ESMDC) and its application in design for oxidative coupling of methane. Comput Appl Chem, 1994, 13(3): 167-171
- 8 黄遵楠, 廖代伟, 万惠霖, 张鸿斌, 蔡启瑞. 计算机辅助催化剂组分分子设计的思想和实现. 计算机与应用化学, 1997, 14(1): 12-16  
Huang Z N, Liao D W, Wan H L, Zhang H B, Tsai K R. Computer-aided molecular design for catalyst components. Comput Appl Chem, 1997, 14(1): 12-16
- 9 廖代伟, 龚文华, 李堂秋, 林银钟, 郭峰, 蔡俊修, 万惠霖, 蔡启瑞. 金属氧化物催化剂分子设计的物理化学判则和数学模型. 厦门大学学报(自然科学版), 1994, 33(Sup): 190-197  
Liao D W, Gong W H, Li T Q, Lin Y Z, Gou F, Cai J X, Wan H L, Tsai K R. Physical and chemical rules and mathematical models for molecular design of metal oxide catalysts. J Xiamen University (N S), 1994, (Sup): 190-197
- 10 廖代伟, 黄遵楠, 林银钟, 龚文华, 万惠霖, 张鸿斌, 蔡启瑞. 甲烷氧化偶联金属氧化物催化剂组份分子设计程序. 厦门大学学报(自然科学版), 1996, 35(1): 133-136  
Liao D W, Huang Z N, Lin Y Z, Gong G W, Wan H L, Zhang H B, Tsai K R. Molecular design program for catalyst composition of oxidative coupling of methane. J Xiamen University (N S), 1996, 35(1): 133-136
- 11 黄遵楠, 廖代伟, 林银钟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统中推理机的设计. 厦门大学学报(自然科学版), 1996, 35(3): 389-392  
Huang Z N, Liao D W, Lin Y Z, Zhang H B, Wan H L, Tsai K R. Realization of inference engine in expert system for molecular design of catalyst. J Xiamen University (N S), 1996, 35(3): 389-392
- 12 黄遵楠, 廖代伟, 林银钟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统中数据库和知识库的建立. 厦门大学学报(自然科学版), 1996, 35(5): 739-744  
Huang Z N, Liao D W, Lin Y Z, Zhang H B, Wan H L, Tsai K R. Construction of data base and knowledge base in expert system for molecular design of catalyst. J Xiamen University (N S), 1996, 35(5): 739-744