

关于表彰一九九五年福建省 计算机学会学术年会优秀论文的决定

闽计学[1995]04号

福建省计算机学会于1995年12月1日至3日在福州召开“一九九五年福建省计算机学会学术年会”。经年会评委会认真评审,学会共评出九五年福建省计算机学会学术年会优秀论文16篇。

为了进一步活跃学会学术气氛,推进学会活动的繁荣,学会决定对评出的优秀论文及作者给以表彰并颁发证书。现将表彰名单公布如下(不分顺序)。

- * 康金章(福州大学) 《结构布局优化 CAD 的一种解法》
- * 郭朝珍(福州大学) 《软插件式 DSS 开发工具的设计》
- * 林桂伍(福州大学) 《3D STUDIO 动画制作探讨》
- * 陈新、吴宏胜(福州大学) 《神经网络文字识别系统的研制》
- * 达力(厦门大学) 《对管理信息系统设计与开发的一些实际问题的探讨》
- * 黄遵楠、廖代伟、张鸿斌、万惠霖、蔡启瑞(厦门大学) 《甲烷氧化偶联反应催化剂分子设计专家系统的建立》
- * 吴顺祥、陈明堂(厦门大学) 《面向机械设计的知识获取环境》
- * 严桂兰、刘甲耀(华侨大学) 《功能模块集成化技术》
- * 余金山(华侨大学) 《基于 TURBO PROLOG 的面向对象方法》
- * 宁正元(福建林学院) 《排序新方法 - 共享栈排序及实现》
- * 王宜怀(福建林学院) 《MCS-1 型微电脑皮带称的研制》
- * 黄玉钦、钱仁锋、王梅集(福建省经济信息中心) 《基于神经网络的经济预测方法》
- * 林曰钿(福建科发新技术公司) 《聚合酶链反应技术及医用自动热循环装置方案》
- * 张月燕、陈轸(福建省建筑设计研究院) 《民用建筑设计劳动定额使用软件总体设计》
- * 李鹏(永定矿务局) 《煤炭自动化计量中的微机动态轻轨衡系统》
- * 黄清虎(厦门工业学校) 《谈表格格式的设计、数据表示与编辑修改》

福建省计算机学会

1995.12.3

甲烷氧化偶联反应催化剂 分子设计专家系统的建立

黄遵楠 廖代伟 张鸿斌 万惠霖 蔡启瑞

(厦门大学化学系 物理化学研究所 固体表面物理化学国家重点实验室)

摘要: 从建造专家系统的理论体系出发,结合我们以前在计算机辅助催化剂分子设计方面所做的工作,从总体上确立了基于甲烷氧化偶联(OCM)这一目前国际上极为关注的催化氧化反应的催化剂组分分子设计专家系统的基本结构框架,对本系统的任务功能、体系结构与支持界面、数据库与知识规则库的建立、推理机的设计等几个部分分别进行了论述。通过对 OCM 反应的多相催化机理、催化剂组分活性因素、

复合氧化物的有效基团功能以及表面活性位等领域知识的深度分析和组织表达,详细地讨论了该系统数据库的内容构成和建立知识库时所采用的,与在不同分类层次上的知识规则相适应的较为合适的知识表示技术,如产生式表示、谓词逻辑、框架结构、语义网络等。在推理机的设计中,则针对该特定的专家系统,选择确定了几种合适的知识推理技术,并以一些在文献上已报导的 OCM 的催化剂的合理活性推理图作举例说明;同时,考虑到推理机进行目标求解的推理效果和效率,也涉及了对推理的搜索和控制策略方面的具体论述。

关键词: 甲烷氧化偶联 专家系统 催化剂分子设计 性质数据库
知识规则库 推理机

专家系统^[1-5,7]作为人工智能(AI)领域三大前沿之一,其含义是以知识为基础的智能推理计算机程序系统,是应用 AI 技术,根据一个或多个人类专家提供的特殊领域知识进行推理,模拟人类专家作出决定的过程来解决那些需要专家才能解决的复杂问题。由于催化方向领域众多,催化过程活性因素的复杂相关性和全面催化机理研究还不太深入。而且,尽管在八十年代专家系统得到了很大的发展,但其建造的理论体系和实现手段也不完善,因而还无法开发一种能普遍应用的催化剂分子设计的专家系统。鉴于在金属氧化物催化剂上甲烷氧化偶联催化机理研究地较为深入和透彻,又有文献上报导的较多的活性复合氧化物催化剂可以借鉴。因而建造基于甲烷氧化偶联反应(OCM)的催化剂分子设计的专家系统较为可行,探索性为以后开发设计其它反应方向的活性催化剂的专家系统创立一种骨架模式,并为最终实现在分子水平上运用计算机的人工智能来设计化学反应的有效催化成分打开一个突破口,应用它来指导实验,制备和开发在人类生活的各个领域包括化工、医学、能源和新材料等方面合成新产品所需的工业催化剂。

建造基于 OCM 反应的催化剂分子设计的专家系统,其关键的问题在于对 OCM 反应的领域知识的深度分析和组织表达,合适的知识推理技术和推理控制策略的选择确定以及在实际系统建造中编程的具体实现。

1. 本专家系统的系统功能、体系结构和支持界面

1.1 系统功能

作为设计型的这一专家系统,除了具有一般的专家系统内部实现所需的通用功能如专家知识的获取、知识规则的存贮、推理策略的控制和推理过程的解释等,从外部实现其最终的目标任务 OCM 反应的活性催化剂组分的生成来讲,具有下列四个不同层次的任务功能:

(1) 专业知识数据的检索。此功能接口提供用户从知识数据库中检索某项专业数据,供其作为设计催化剂活性组分的某条性质约束的范围基准;如某类主体氧化物 AO_x 需掺杂与 A 离子半径匹配但价态较低的阳离子 B 时,此时需要 A 离子的半径作为离子半径匹配的标准来输入。

(2) 催化剂活性的预测。提供这样一个接口,当用户仅输入他所想要选择准备在实验中使用的催化剂(单一或复合催化剂),由专家系统内部推理机通过采用前向链控制的正向推理即可得出其活性大小,可信度范围,并对其内部的推理过程作出必要的解释,实现用计算机来辅助验证用户自己所筛选的催化剂的活性和通过已知活性催化剂来检查所制定的知识规则的正确程度。

(3) 预测的催化剂活性与实验验证偏差的诊断和活性催化剂活性性质的判断总结。如果计算机设计出来的复合催化剂经实验验证与专家系统不精确推理判断出来的活性还存在一定偏差,例如对某类复合氧化物催化剂,计算机认为其具有适当活性而经实验确证发现其活性极低,由于催化过程影响因素的复杂性,这时专家系统需判断从两个小功能选择一个来实现,通过机器学习,要么纠正

偏差,修改规则库中某条可信强度较低的知识规则,要么经过智能催化机理分析,推测有某个不太为人注意的性质起活性限制作用,并经专家分析,编辑成知识规则,加入规则库。

(4) 活性催化剂的组分设计。通过用户输入他所期望的某些活性性质约束,通过推理机的双向链控制的正反推理,由专家系统设计出目标催化剂组分,达到在分子水平上设计 OCM 反应催化剂的目的。

1.2 体系结构

本专家系统的体系结构基本上采用了以 MYCIN 系统为代表的基于规则的专家系统结构^[3],其结构图如图 1 所示。作为与流行 ES 的一般结构不同的方面在于,它把知识库衍生为性质数据库和知识规则库。性质数据库用来存贮元素、氧化物、卤化物、键类等性质数据,贮留在外存,而知识规则库则是由催化领域的知识规则组成,可以贮留在内存或外存,它随着专家系统的运行可通过知识获取程序进行动态的增添和删除。中间存贮区则是存储关于问题的事实、数据、初始状态、中间状态和目标以及用作系统解释的推理信息,随着问题的不同,中间存贮的内容也是动态变化的。

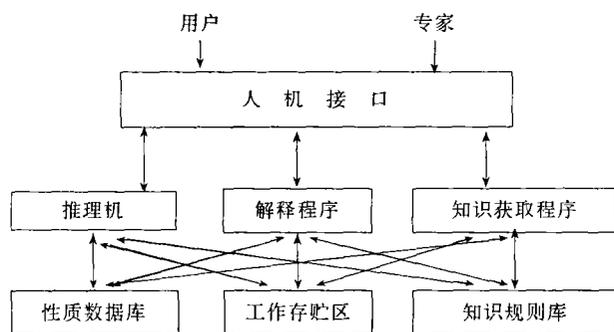


图 1

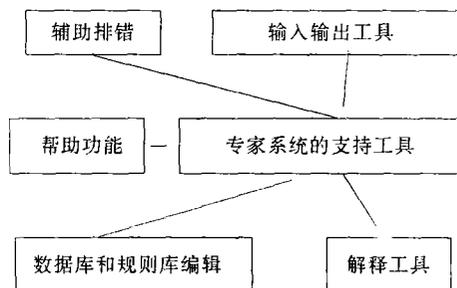


图 2

1.3 支持工具

专家系统的支持工具^[4]是由帮助程序设计的工具和增强系统功能的工具组成。该系统提供支持使用信息和数据、知识规则检索的帮助功能,一个用户输入输出的图形化的菜单工具,一个供知识库和数据库编辑的接口和专家系统软件所特有的解释工具。如图 2

2. 数据知识库和知识规则库的建立

2.1 数据库的构成和领域知识的分类

催化专家在设计某个反应的有效活性催化剂时,需要大量的元素、化合物和一些功能基团的性质数据来支持他的判断和推理。例如在选择某类氧化物催化剂,他要考虑反应分子在催化剂表面可能形成的几种吸附态,是单基吸附还是双基吸附,并经反应后生成目标产物的吸附态这一转化过程的活化能数据如何,是明显降低了反应物在气相中直接作用所需的活化能还是基本不变,这就需要部分键能、吸附热和活化能等数据。因此,在建造本专家系统时,计算机需要贮存许多必要和完善的性质数据来支撑它对目标求解的智能推理。我们认为在设计 OCM 反应的活性催化剂所需的性质数据项有:

元素的离子半径、元素的变价性、元素离子的酸碱性、可形成不同氧物种的金属元素类型、金属氧化物和卤化物等的晶格类型、电导性(氧化物中氧阴离子的迁移性),相转变温度(熔点或其最低的升华、分解或转变温度)、键能数据、某些吸附物种(O_2 、 CH_4 、 CO 、 CO_2 、 C_2 烃)在金属氧化物催化剂表面的吸附能和有关正副反应的活化能等等。

数据库从知识库中独立出来,是为专家系统提供对知识数据的大型存储、并发控制、有效存取等

手段,而知识库的建立,却是专家系统的基本特征和行为。领域知识,作为专家系统进行问题求解智能推理的基础,存在着不同深度、不同层次的类型,在推理过程中所起的作用不同,并有其较为合适的知识表示。对于本专家系统涉及的在催化方面的领域知识,大致可分为以下四种类型^[3,6,10,11]:

(1) 说明性知识。是关于催化领域的事实、定理、方程、实验对象和操作的常识性、原理性知识。例如:氧化钠是一种碱性氧化物,氧化锆在一定的条件下能形成氟化钙晶格类型,氧化镧能够在 OCM 反应温度下稳定存在。说明性知识可以用语义网络或谓词逻辑来表达,它的形成可以是由知识工程师直接抽取存贮在知识库,也可以由具有机器学习的推理功能把描述控制策略的过程性知识作用于数据库中的性质数据来生成。物种框架装填槽的侧面大多数就是一种说明性知识。

(2) 描述控制策略的过程性知识。其中即有常识性、原理性知识,又有经验性知识,它是专家系统智能推理的骨架组成。例如:

Rule1: 如果主体组分是活性相并掺杂以作为添加剂、稳定化剂、惰性稀释剂或气相含氧活性自由基的猝灭剂的修饰成分,则复合组分是 OCM 反应的活性催化剂。

Rule2: 如果某组分具有缺陷的氟化钙晶格类型,则该组分是 OCM 反应的活性催化剂。

Rule3: 如果在某主体氧化物 AO_x 或复氧化物 AB_yC_2 中掺杂以半径与 A 相近而价态较低的阳离子 A', 则该复氧化物是具有缺陷结构的活性相。

.....

Rule21: 如果氧化物 M_2O_n 满足 $0.79/1.32 \leq r_{M^{n+}}/r_{O^{2-}} \leq 1.34/1.33$, 则 M_2O_n 可以形成氟化钙晶格类型。

(3) 与领域有关的问题求解知识。属于经验性知识,它是对于解决某些问题失灵如造成推理的组合爆炸而出现的启发性算法,是一些单凭经验的规则、含义模糊的建议、不确切的判断标准等。例如,由参考文献上大量报导的 OCM 反应的活性催化剂的三种主要类型和两类新体系所抽取的知识规则应属于这一类知识。例如:

Rule51: 如果某复合催化剂中含有稳定价态阳离子的不可还原金属氧化物组分,则该催化剂可能是 OCM 反应的活性催化剂。

Rule52: 如果某复合催化剂中有 IV、VA 或 IIB 族金属的可还原金属氧化物组分并有碱性氧化物负载,则该催化剂可能是 OCM 反应的活性催化剂。

Rule53: 如果某复合催化剂中含有过渡金属氧化物组分并有碱金属氧化物(磷酸盐、硫酸盐、氯化物)促进,则该催化剂可能是 OCM 反应的活性催化剂。

(4) 元知识。元知识就是关于知识的知识,利用元知识建立的元规则可以解决规则匹配的冲突问题,是与领域问题有关的控制策略选择规则。

2.2 知识表示技术

知识表示研究的主要问题是设计各种数据结构,即知识的形式表示方法,研究表示与控制的关系,表示与推理的关系及知识表示与其它研究领域的关系,其目的在于通过知识的有效表达使专家系统程序能利用这些知识进行推理和作出决策。针对上述领域知识的分类,我们拟采用的知识表示技术有框架结构、产生式表示、谓词逻辑、语义网络。

(1) 框架知识表示

表示知识框架^[9]的形式描述如下(结构 1),它可以看作是一种数据结构,用来描述有关事物在特定情况下的典型特征,能提供其装填数据项的功能,然而更重要的是它还具有与目标知识框架匹配的合情推理功能,从而简化推理机把数据转化为知识而需采用的算法。例如:有一个 Bi_2O_3 的框架结构(结构 2),在专家系统设计某类由碱金属氧化物负载的某些 IV、VA 或 IIB 族金属的可还原金属

氧化物催化剂时,由其知识规则,可以给出其需求解的复合催化剂中活性组分的目标框架(结构3),与数据知识库中的物种框架相匹配,因为匹配大致成功,就可以确定该 Bi_2O_3 是该类复合催化剂中活性组分,成为这个问题求解的相应事实存储在工作区,供后续推理使用。

[框架名]

槽名 i: 侧面名 i1(值 i11, 值 i12)

侧面名 i2(值 i21, 值 i22)

....

槽名 j: < 框架名 >

....

< 附加过程 >

结构 1

[活性组分]

酸碱性: 碱性

氧化物: 氧化物

阳离子变价性: 稳定多价态

晶格类型: 氟化钙、氧化铈晶格

阳离子元素族类: IVA / VA / IIB

相转变温度: 600℃

结构 3

(2) 产生式表示

在催化领域的各种知识单元之间存在着大量的因果关系,这些因果关系或者说是前提和结论的关系,用产生式表示是非常合适。一条产生式规则的前提部分可以是事实库中的某个事实或另一条产生式规则的结论部分,当必要的事实从数据库中转入工作存储区时,并同时选择规则库中的某个规则前提部分与之匹配,成为可用规则。其使用的结果得到一个结论而产生一个行动,从而使工作存储区的事实发生状态转移,直到满足约束条件的目标状态,成为问题最终的解。

产生式表示法表示知识规则的形式是“如果 条件 那么 结论”,条件与结论的表示形式可用三元组实现,三元组的三个元素分别代表主语、谓语、宾语或表语,并按下面方式排列(主语 谓语 宾语或表语)。用三元组表示上面的知识规则举例如下:

Rule1:(催化剂 有 活性相)&(催化剂 有 修饰组分)

----->(催化剂 是 活性催化剂)

Rule2:(组分结构 是 缺陷结构)&(组分晶格 是 氟化钙晶格类型)

----->(组分 是 活性相)

(3) 谓词逻辑

知识的逻辑表示法是指各种基于形式逻辑的知识表示方案。它存在着多种形式,但使用最为广泛的是谓词逻辑。谓词是定义在某一集合上的取值为“真”或“假”的函数,将谓词的变量客体代以具体值后,可以得到一句有真假意义的话。谓词逻辑的原子命题和谓词公式可以很容易地表示数据库中的领域知识,如氧化钠是一种碱性氧化物可表示为 $\text{Is}_a(\text{Na}_2\text{O}, \text{oxide}) \& \text{with}(\text{oxide}, \text{base})$,氧化铈具有氟化钙晶格类型可表示为 $\text{with}(\text{ZnO}_2, \text{FS_stru})$. 谓词逻辑还跟产生式表示法有密切的联系,通过子句、复合谓词公式可以提供很好定义和理解的表达事实和规则的形式,并且具有从旧的知识产生或推理出新的知识的能力。复合谓词公式、子句是通过谓词的原子命题在逻辑连接和 &、或

|、非~的蕴含作用下连接而成。区别于建立在三元组数据结构上的产生式表示，用谓词逻辑来表示知识规则举例如下：

Rule1: 含有(复合物, 活性相)&|含有(复合物, 添加剂)|含有(复合物, 稳定剂)|含有(复合物, 惰性稀释剂)|含有(复合物, 猝灭剂)|
 ----->是(复合物, 活性催化剂)

3. 推理机的设计

3.1 知识推理技术

知识推理是指在计算机或智能机器中, 在知识表示的基础上, 利用形式化的知识模型(与问题有关的知识的符号体系)进行机器思维, 求解问题, 从而产生知识推理的智能操作过程。研究知识推理技术, 目的就是寻找解决问题, 实现从初始状态转移到目标状态的智能操作序列。

基于适合建造 OCM 反应的催化剂分子设计的专家系统的具体知识表示技术, 我们采用了对不同的催化领域知识表示分块设计其相应的知识推理技术, 即有基于规则表示法的产生式推理(如图 3)、基于知识框架匹配的合情推理、基于语义网络的图搜索方法、基于谓词逻辑的演译推理和基于一些数学公式的算法推理。为了协调各种不同的推理技术以提高其推理效果和效率。我们还在其更高层次上穿插一些启发性推理并建造元推理机来控制一些利用领域知识的目标推理机来进行问题(设计活性催化剂)的优化和分层次求解。

图 3 利用产生式表示法推理技术推断复合组分 $\text{ThO}_2 - \text{La}_2\text{O}_3 - \text{BaCO}_3$ 的活性推理图

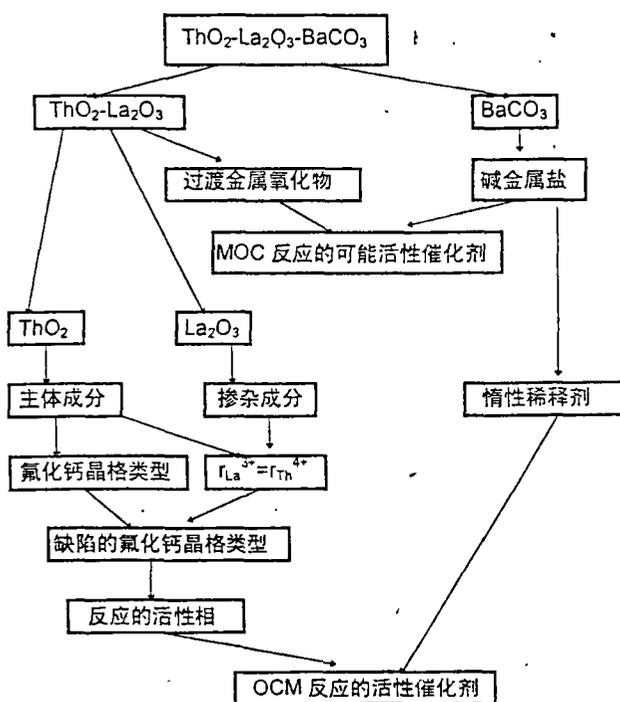


图 3

事实上, 专家系统所处理的问题大都为不确定性的, 本专家系统也不例外, 甚至比一般诊断型的专家系统问题求解的不确定性程度高得多。这是由于在化学反应过程中催化机理的复杂相关性所决定的。在一个催化反应过程中, 其催化环境的稍微变化会导致其起活性作用的因素会有所不同, 同时, 本专家系统的性质数据知识库的性质实验数据也是很不完善, 在我们所制定的知识规则中, 其前

提与结论之间不可避免存在着一种不确定性的因果关系,因而,建造本专家系统所采用的推理技术应该是不精确的似然推理。从推理的线路上来看,似然推理是以上述所述数理逻辑确定性为基础,而加入了一些确定性因子如置信度、可能性强度以及主观概率等来控制推理链的形成。然而,由于在催化剂分子设计的理论水平上还不够完善,因而在其领域内的知识规则可信度的确定还带有相当的模糊性。所以我们认为,只要能为实验室制备活性催化剂起指导作用,在计算机推理过程中对可信度的计算和控制上可以稍微放松,而代替以一个功能强大模仿催化专家在分子水平上设计催化剂组分的思考推理线路的解释器。

3.2 推理的搜索策略

在任何类型的专家系统中,如果组织推理失败,将导致系统效率低和可靠性差。而如何组织推理的关键是搜索策略的选择问题,它直接受到现实任务复杂程度的影响,如求解空间,知识表示等。表示求解问题全部可能解及其相互关系的空间大小不同,会经常导致所采用的搜索策略效率低,甚至因产生搜索的组合爆炸问题而无法求解,因而在本专家系统的推理机设计中为克服上述问题,采用了把解空间分解,解空间分层逐步求精等不同搜索策略并建立其相应所需的启发性知识规则和元规则,从而利用一些具有统计性质的领域知识和元知识来帮助求解搜索。

OCM反应的复合氧化物活性催化剂除了包含其必须的活性主体组分,有时还需加入参与活性相生成的添加剂,以抑制表面深度氧化反应起稳定弱活化的双氧物种(在OCM反应温度下的活性氧物种 O_2^-)的稳定化剂,还有稀释活性相以调节表面活性位浓度在最佳范围的惰性稀释剂,以及作为气相含氧活性自由基($\cdot O$ 、 $\cdot OH$ 、 $\cdot O_2H$ 并包括 H_2O_2)的猝灭剂等。因而,设计出来的活性催化剂可能会包含三、四种甚至更多种的金属阳离子(如 $K^+ - Th - La - Ca - O_x/BaCO_3$ 体系)^[6]。从理论上讲,在设计活性催化剂时只要保证其表面一定的活性位浓度,可以掺杂不同阳离子的稀释剂、稳定化剂以及猝灭剂等而生成太多所谓它认为的活性复合氧化物催化剂。而从催化过程的现实性来讲,尽管活性因素的相互制约,这些催化剂的活性变化或许很小,因而只需保证或控制其具有三、四种阳离子(活性相组分一致)的某种催化剂作为专家系统设计出活性催化剂类型标准就行了,因此需要一定的元规则来控制解空间的过于庞大。所谓的解空间分解法是指把求解空间分解成较小的若干子空间,通过搜索各个较小的子空间来取得最终的解。当由本专家系统预测某种复合氧化物(含有三四种不同组分)对OCM反应的活性如何时,我们可以由统计推理得出的几种活性催化剂的分类作条件部分最佳模式状态匹配来进行启发性的推理判断,从而缩小所需验证的求解空间,而且有时还借助于通过用户接口传递过来的外界信息来控制搜索路径,尽可能提高专家系统推理机的推理效果和推理效率。

3.2 推理的控制策略

在一个专家系统的推理机中,控制策略主要是解决整个问题求解过程的控制问题,它包括知识的激活与选择,推理过程的控制,冲突的消解等。基本的控制策略有数据驱动的控制策略(正向推理)、目标驱动的控制策略(反向推理)和混合控制策略(正反向混合推理)。合适的控制策略取决于问题的求解方式,是并发的求解方式还是序贯的求解方式,而这些是由求解问题的特点和任务的性质所决定的。

在本专家系统里,前两个层次目标功能的问题求解即专业数据知识的检索查询和催化剂活性的总体预测采取了数据驱动的控制策略,这是一种模式制导的推理,其主要优点是充分利用用户提供的信息。用户首先必须输入有关当前问题的信息,如由催化工作者提出的假设对OCM反应有预期的催化活性的复合氧化物来作为中间存贮区数据库中的事实,由专家系统的推理机从这些数据出发,

经过“识别—动作”的前件推理,正向使用规则(让规则的前提与知识数据库和中间存储区的数据事实匹配),在经过若干规则的跃迁最终达到所需求解的目标状态。

而目标驱动控制策略是一种反向状态链的控制,其基本思想是选定一个目标,然后在知识库中查找能导出该目标的规则集,若这些规则中的某条规则前提与数据库或工作存储区中的数据事实匹配则执行该规则。这种目标制导的推理适合于空间较小的问题求解,而且有利于向用户提供明确的解释并告诉用户所要达到的目标为此所用的知识规则。这种用堆栈技术实现由顶向下控制由于在催化剂组分设计中其具体目标的不确定性(抽象目标明确—要求合成满足一定约束条件的活性组分)而似乎难于单独使用。然而从在经实验确证后已知活性程度催化剂来分析判断通过已建立的知识规则形式存在的活性性质机制上来看,此控制策略还是比较合适。如果经过此反向推理总目标能够求解,则验证了催化专家所制订的知识规则的可信性。如不能导出目标,则说明或许还有未知的催化剂活性性质未被建立和认可,在由专家系统经过某种内在的自然假设从而能够推出已知的目标,抽取其假设供催化专家分析,进行催化剂活性的一部分机理探索,如果被催化专家认可,在满足知识规则的一致性检查后就可建成知识规则加入知识库,扩充专家系统所贮存的专家知识。

混合控制策略集中了数据驱动控制和目标驱动控制的优点。它是通过数据驱动帮助选择某类目标,然后通过目标驱动求解该目标的双向控制。一般有四种类型的混合控制过程,包括正反向不精确推理,正反向同时推理,单步正向、全局反向混合推理和生成与测试(广义混合推理)。本专家系统最高层次的目标求解即催化剂活性组分的分子设计采用了生成与测试。首先由用户输入他所认定的最为重要性质的约束条件,通过前向链控制的正向推理包括一部分部分推理,在专家系统的工作存储区“生成”一批目标,然后经由模式识别的活性目标的匹配寻找能较为确信导出该目标的规则(包括上述只采取部分条件匹配推理的规则)执行其动作还需的部分事实数据条件由专家系统序贯提问用户回答。再由这些中间过程所获得的约束条件来逐个“测试”目标,从而达到进一步筛选目的,最终达到总目标的求解即输出它所认为比较理想的活性催化剂为止。而且,还可以对用户回答无需完全肯定或否定(即不明确的约束条件)分层次提示性输出符合各个层次的催化剂组分,有较多的组分可以供后续实验的验证。

参考文献

- [1] 施圣荣等,人工智能—专家系统—程序设计,辽宁大学出版社,1992
- [2] 杨叔子等,基于知识的诊断推理,清华大学出版社,1993
- [3] 张金寿等,专家系统建造原理及方法,中国铁道出版社,1992
- [4] 施鸿宝等,专家系统,西安交通大学出版社,1990
- [5] 黄可鸣,专家系统,东南大学出版社,1990
- [6] 刘玉达等,甲烷氧化偶联的分子催化
- [7] 蔡启瑞等,碳—化学中的催化作用,化学工业出版社,1995
- [8] Steels, L. , The Second Generation Expert System, FGCS. Vol.1, No.4 , 1985.
- [9] Lee, N. S. , A Computational Paradigm that Rule - Based and Model - Based Reasoning in Expert Systems, Int. J. of Intelligent Systems, Vol.5, No.2, 1990.
- [10] *Mcdermott, D. , A Genetal Framework for Reason Maintenance, AI, Vol. 50, No.4, 1991.
- [11] Otsuka, K. etc. , Successful Design of Catalysts, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [12] Lunsford, J.H. , New Frontiers in Catalysis. eds. Guzzi, L. etc, Elsevier Science Publications, Amsterdam, 1993.