

# 模糊邏輯在化學上的應用

蘇育任

國立臺中師範學院科學教育中心

**摘要：**控制論大師 Lofti Zadeh 在一九六五年提出「模糊邏輯」的觀念，以模糊集合來表現一切含有不精確 ( Vagueness ) 特性的模糊概念。針對論域上的所有元素為對象，處理客觀實際問題，既能與精確數學結合有別於精確數學之「絕對嚴謹」，又能接受「誤差容忍」的特性，因而它逐漸被推廣運用，蔚為當前國際間新興的學科。

由於大多數化學概念均有其模糊性，而非十分精確，模糊邏輯的適時出現，對化學研究具有莫大助益，可應用於下列領域：化學計量學、數據估測、篩檢危險性化學藥品、設計新的農業化學產品和藥物，以及在模糊過程控制中使用的感應器與控制器等。

## 前 言

近年來，「模糊邏輯」( Fuzzy logic ) 在科學與商業的許多領域，重要性日益增加；到目前為止，全世界已經有大約三萬篇以上這方面的學術論文發表了。尤其是在日本人將模糊邏輯運用於子彈列車之設計後，它已脫離學術象牙塔，不再是專屬於數學家與電腦科學家的專業知識，神秘而遙不可及；相反地，經由通俗暢銷書與新聞媒體廣告等管道的推波助瀾，它已成為家喻戶曉的日常用語了。

最令人矚目的，莫過於有許多企業運用模糊邏輯，全力開發新奇的產品，價值數十億美元，每年全世界經審核發給和這方面有關的儀器、機械等之專利數目，至少有三百五十件以上。日本更全力發展，獨佔鰲頭，單單去年一年中，其外銷以模糊邏輯設計的零組件，總值即達七十億美元<sup>(1)</sup>。可預見今後模糊邏輯的發展必將急遽進步，心理學者 Zetenyi 即指出模糊集合理論對心理學的研究，除了用作通常思想的一種「模型」( model ) 或「隱喻」( metaphor ) 之外，更有助於數據分析及理論建構<sup>(2)</sup>。然則它對化學的影響究竟如何，又有那些應用，實在值得加以評估。

## 模糊數據、模糊集合與模糊邏輯

到底什麼是「模糊邏輯」呢？原來「模糊」( Fuzziness ) 這個觀念，是在一九六五年由數學家 Lofti Zadeh 提出的；他認為人腦有一眾所週知的傾向，即以含糊的

概念進行思考。換言之，模糊或「含混不清」(Vagueness)是人腦與所有物理、社會系統必然的一種特徵。當吾人有限的力量不足以完全處理一系統的複雜性時，便不可避免地必須使用模糊概念來加以處理。一般說來，若系統愈複雜，吾人對其描述即益發模糊<sup>(3)</sup>。

模糊邏輯喚醒吾人用一種嶄新的方式，以描述並摹擬物理世界的實體。以前我們認為每一個命題或敘述非「對」即「錯」(即只有真、偽兩個可能)，現在我們却相當能接受科學研究的結果並非完全精確。在模糊集中，集合內各元素對此集合的「隸屬程度」(membership)並非「有」、「無」而已，而是具有程度上的差別，每一個元素對該集合的隸屬程度各自不同，每一元素有每一元素的隸屬程度。茲舉一例，今有集合 $A = \{ \text{所有老人} \}$ ，其中所含元素包括很老的人、相當老的人、普通老的人…等等，很明顯的，集合A的元素個數，也會因吾人年歲的增長而隨著更迭。

Zadeh 提出一集中，其元素的模糊性(fuzziness)可藉著「隸屬函數」(membership functions)與每一個別元素的聯結，加以表徵出來，隸屬函數的值域在0~1之間。儘管在一般集中，元素的隸屬程度一定是截然清晰的，其聯結的隸屬函數值若非零則為1；在模糊集中，隸屬函數值却可能是由0到1之間的任何值<sup>(4)</sup>。這種具有模糊性質的集合，較諸明確集合理論之嚴謹定義，更能用來表徵現實世界中的情況。比如說，水分子可當成某種程度的酸，又鎳在某種程度上亦可算是金屬，而人類所製造出來的藥物都具有某種程度上的療效。簡言之，模糊集合運用於處理下列情況時特別有用：不精確的敘述、定義不清晰的數據、不完全之實驗觀測結果以及不精確的推理等。

正因這種特性，使模糊邏輯能夠考慮到所有介於黑白兩極間的灰色部份，換言之，模糊邏輯容許吾人考慮到介於「真、偽」命題間所有可能的不同命題。舉例來說，設吾人想以物種在水溶液中的行為來定義強酸的集合，其一極端是： $\{ 0.1 \text{ N 之酸性溶液，其 } 25^\circ\text{C} \text{ 時之 pH 值小於 } 2 \}$ ，這種定義極為清楚明確，任何這類的酸皆屬於強酸集合中的元素。不過當我們思考某些酸，其pH值是漸進增加時，要怎麼辦呢？我們應當取什麼作界限呢？這時就必須取某一特定值為界限。在一般集合論中，吾人可採用「精準的決斷值」(Sharp cut-off value)，例如定 $\text{pH} = 2.0$ 為界限；如此一來，凡 $\text{pH} > 2$ 的酸就不屬於強酸的集合了。相反地，在模糊邏輯的集合論之推理，係以酸度的某種範圍作為界限，如此定義強酸的作法較有意義。因而0.1 N草酸( $\text{pH} = 1.6$ )應可完全屬於強酸的集合，0.1 N醋酸( $\text{pH} = 2.9$ )在某種程度上可算強酸，而硼酸

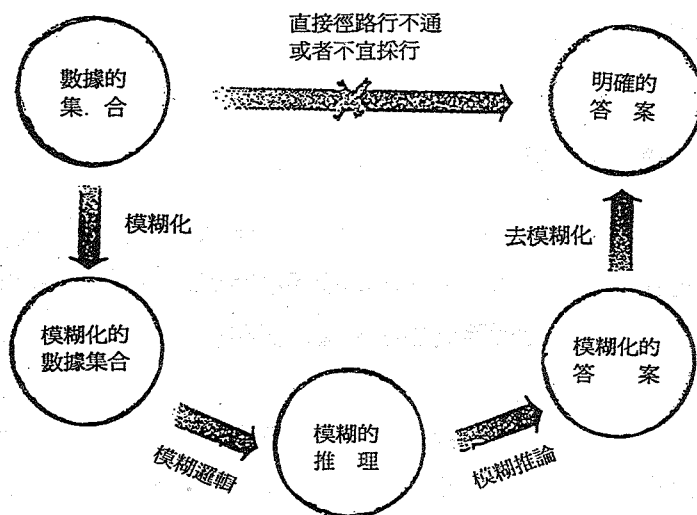
( $\text{pH}=5.2$ )則一點兒也不能算是強酸。類似的推理可運用到其他對酸性強度的不同量度上，例如Hammett的酸性函數<sup>(5)</sup>。

## 模糊邏輯簡介

上述模糊集合建構的歷程，基本上可毫無限制地運用到化學的領域中，諸如金屬集合、共價分子集合及致癌物集合(carcinogens)…等等，然而建構了這些集合，才只不過是開啓模糊推理的第一步而已。接下來，便須應用模糊邏輯的法則，對這些集合進行各種運算。

吾人今日所稱之模糊邏輯，只不過是已應用在一般集合的各種運算法則，再加上一一些必要的修正，以容忍集合的模糊性；相當幸運地是，電腦能夠毫不費力地運用這些法則。以模糊邏輯運算的最大優點，在於吾人目前已完全可接受不明確的輸入，像是「酸性高」、「共價性弱」以及「幾乎是金屬」…等這些例子。亦即今後凡是不夠精準、定義不清楚，甚或只是純猜測的研究數據，皆可輸入電腦加以運用，蓋因如同上述這些描述性的術語，在起始的「模糊化歷程」(fuzzification process)，皆可賦與其一系列的值<sup>(6)</sup>。

在使用模糊邏輯之法則運算之後，輸出之結果通常都只是模糊的答案，故吾人必須以「解模糊化步驟」(defuzzification procedure)，來求得明確的答案。圖一顯示運用模糊邏輯，解答科學問題時，所涉及之各階段<sup>(7)</sup>。



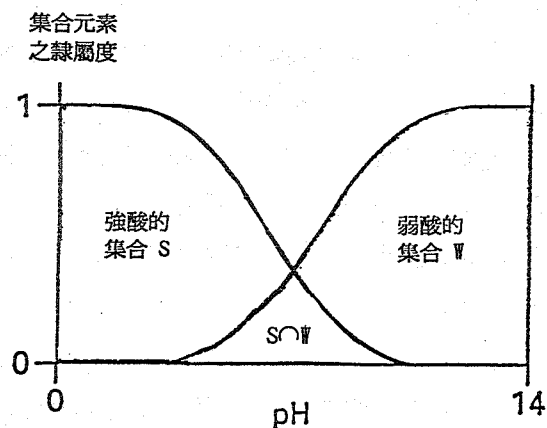
圖一、運用模糊邏輯解決科學問題的步驟

為說明模糊邏輯如何應用於模糊集合，今考慮下列兩個集合：S 代表所有強酸所成之集合，W 則代表所有弱酸所構成的集合。假設吾人希望得知兩集合之交集內所含元素，亦即兩集合共有的元素。若 S 與 W 為一般常見之明確的集合，則 S 與 W 之交集必定為空集合，即  $S \cap W = \phi$ ，蓋因以上兩集合間並無共同元素。然而，在模糊集合中，兩者的交集事實上是包含於 S 與 W 交集內的最大模糊集合，以集合元素的隸屬度 (membership degree)  $\mu$  而言，其交集可由下式予以定義出來：

$$\mu_{S \cap W} = \min \{ \mu_s, \mu_w \} \quad (\text{min 是取最小值})$$

化學的領域中，酸鹼與 pH 值之關係很適合用做說明的範例。在圖二中，即以曲線面積分別代表 S 與 W 兩集合，則其交集乃是兩曲線下重疊部份的面積。

利用類似的推理與圖形，吾人可找出運用模糊邏輯於某些物質系統時，所做的決定具有之各項特徵。設一系統可用集合 C 加以描述，又所欲達到之目標為 G，則 C 與 G 兩集合所成交集之圖形，與前述 S 與 W 交集的圖形十分相似。因吾人在解決問題時所作的決定，也是根據



圖二、強酸集合 S 與弱酸集合 W 相互交集之假想圖

手中對該問題的已知條件，以及待求得之解答，這兩者的交集其實就是吾人所能想到的最佳解決方案。

## 化學推理中的模糊性之應用

在化學計量學 (Chemo metrics) 的領域中，由於「最適化步驟」(optimizing procedures) 常扮演十分重要的角色，故其運用模糊邏輯推理的例子實在不勝枚舉。茲舉一例，Otto (1990) 曾討論到在製造蛋白質混合物時，如何尋找最合適酶 (enzymes) 的例子<sup>(8)</sup>。

要製造一種血清蛋白 ceruloplasmin (血漿銅藍蛋白) 時，吾人常受二個因素的限制：(1) 達到最大之鑑別敏感度；(2) 使製造成本降到最低。利用前節所述的類似推理過程，便可輕易地產生一合宜的「決策集合」(decision set)；接著採用系統模式協助吾人辨認此集合之最大隸屬函數，亦即先將此集合予以解模糊化；又因以上二種限制

視下列情況而定：pH值的實驗變項、受醣質以及緩衝液之濃度，故這種模擬歷程相當直接了當，解模糊化的結果得到集合中之某特定點，因而得到最適化步驟的確切答案。

其他使用相似模糊集合運算的步驟還包括：(1)由光譜總彙提取特定光譜，此程序係將模糊的樣本光譜與明確的參考光譜加以比對；(2)藉紫外線光譜對藥物成品進行品質管制；(3)將不清晰的蛋白質試樣之層析圖譜，加以分類；以及(4)根據氣體層析圖將石油試樣加以辨認，找出其特性。跟其他傳統儀器分析方法，如紫外線及可見光之光譜儀比起來，模糊邏輯方法可以更有效地達成上述任務<sup>(9)</sup>。

將分子之類的化學實體強區分成各種集合，往往充滿爭議性，而且不拘是分類具有明確定義的實體性質如元素，抑或分類較無明確定義的實體性質如生物活性物種時，皆存在著不少問題。這些問題泰半肇因於吾人以明確集合，進行傳統分類法。在一般的集合論中，每一實體皆被明確地歸類於某特定之一群，然而當這種方式應用到現實世界的問題時，往往不盡理想，蓋因現實世界中的實體經常可歸屬於一個以上的群體，模糊邏輯的法則及程式在描述這些具有重疊性的叢集(overlapping clusters)時，確實要好多了。尤其是方今崛起的新科技—「模糊神經網路」(fuzzy neural network)，是利用經過特殊設計以進行獨立學習的神經網路，可處理模糊數據與準程式，其運用之例子不勝枚舉。無怪乎此新興科技目前已廣泛應用於下列領域：運用數據估測，又如篩檢具有危險性的化學藥品，以及設計新的農業化學產品和藥物等等<sup>(10)</sup>。

## 歷程控制中的模糊性之應用

這個新科技在工業界一直沒有失傳，模糊控制器現在已經扮演新的角色，廣泛被採用於操作、監控複雜的化學製造過程中，如化學反應爐、紙漿製造廠、水泥窯以及玻璃的熔爐中。以上許多過程，很難加以控制，因其牽涉的問題千頭萬緒，涵蓋了過程的「時序變異性」(temporal variability)、非線性行為以及許多目標相互衝突的次級系統。一般之人工操作者，係運用其專業經驗以彌補系統整個製造結果的不確定性，亦即人類傾向於考量溫度與壓力是否合宜，操作步驟有否差錯等。模糊歷程控制顯然十分適合代替人類來管理這些歷程。典型的模糊邏輯控制器，乃依據一套只須大致明確的法則來運算，其中每一法則皆可用下列通式表示：

若(某種狀況發生了)，

則(某種行動必須被採行)。

這種大約規定的法則，導致吾人採取某種特定的行動，例如：若溫度太高，則操作器便

會起動冷却水的供應系統<sup>(11)</sup>。

當前模糊邏輯控制器逐漸被採用於聚合反應器 ( polymerization reactors )，以描述其內之操作情況，因為截至現在為止尚無詳盡的數學模式足敷運用。基本上來說，不斷加入單體與催化劑，便可連續不斷地製造出聚合物的產品。有數個不同的過程參數 ( process parameters )，影響催化劑的流動速率，而該速率正是整個製造過程的主要控制變項，故吾人可由此導出各種“若…則…”的法則。模糊控制器在這個領域中表現得十分有效，使「目標聚合物」( target polymer )的變異度得以降低約 40 %<sup>(12)</sup>。

「渣滓焚燒」( refuse incineration )也是缺乏詳盡數學模式可用的另一種過程，在此過程中，下列三個變因必須妥為控制：(1)預防因渣滓供應不足，而產生燃燒不完全的現象；(2)必須限制渣滓供應量過度，以免火焰熄滅；以及(3)維持最佳的蒸散速率與焚燒爐的溫度。模糊感應器 ( fuzzy sensors ) 便可用來感應下列各變項：焚燒爐中渣滓層的厚度、有毒性氮氧氣體 ( NO<sub>x</sub> ) 的逸散等，使吾人得以將所得資料輸入於模糊控制器中；緊接著模糊控制器便根據「若…則…」的法則予以運算。從過去使用的經驗，顯示模糊控制可以媲美人員的控制，毫不遜色<sup>(13)</sup>。

## 未來的展望

模糊邏輯終於適時出現，提供吾人進入下一世紀所需之有用的工具。若以實利的觀點來看，模糊感應器與模糊控制器的進一步發展，委實令人加倍興奮。即使在今天，這些裝置已能監控並管理許多工業產品的製造過程；他們在各種不同領域中，已展現了非凡的價值，諸如評估環境破壞與污染情況以及核能發電廠的安全…等等。

然而最大的衝擊，其實在於模糊邏輯推理對整個人類知識界的影響<sup>(14)</sup>。從科學哲學的觀點來說，在Kuhn的前典範時期強調一個典範的最基要部份，往往不易用明確的規則加以描述，因此模糊集合與模糊邏輯的處理方式，便能以較佳之理論基礎去排除“不可能”( impossible )之不確定性 ( indetermination )。除了少數能以嚴謹數學加以定義的概念之外，所有化學概念都有其模糊性，而非十分精確，這種開創性的想法，將大大影響了人類下一代對化學的觀點。鑑於先衛的新方法往往是逐漸獲得一般人的接受，「模糊」的這種概念毫無疑問地必將方興不已，蔚為風氣。

## 參考文獻

1. D. McNeill and P. Freiberger, Fuzzy logic. New York : Simon and Schuster, 1993.
2. T. Zetenyi (Ed.), Advances in Psychology, Vol. 56., North-Holland: Elsevier Science Publishers, 1988.
3. L. Zadeh, Information Control, 1965, 8, 338.
4. M. Roubens, Fuzzy Sets System, 1978, 1, 239.
5. D. H. Rouvray, Chemistry in Britain, 1995, 31(7), 544.
6. D. H. Rouvray, Chemistry in Britain, 1993, 29, 495.
7. B. Kosko, Fuzzy thinking: The new science of fuzzy logic. New York: Hyperion, 1993.
8. M. Otto, Anal. Chim. Acta, 1990, 235, 169.
9. U. Horchner and M. Otto, Journal of Analytical Chemistry, 1992, 344, 217.
10. M. M. Gupta and D. H. Rao, Fuzzy Sets Systems, 1994, 61, 1.
11. P. Bhagat, Chem. Eng. Prog., 1990, 86, 55.
12. B. Roffel and P. A. Chin, Hydrocarbon Processing, p.47, June 1991.
13. H. Ono, T. Ohnishi and Y. Terada, Fuzzy Sets Systems, 1989, 32, 193.
14. T. S. Kuhn, The Structure of Scientific Revolutions. Chicago: University of Chicago Press, 1967.

(收稿日期：84年9月7日，接受日期：84年12月11日)

# The Application of Fuzzy Logic in Chemistry

Yu-Jen W. Su

Science Education Center

National Taichung Teachers College

## ABSTRACT

The notion of fuzzy logic was first put forward by Lofti Zadeh in 1965 and since then has found widespread and growing acceptance around the world. Zadeh proposed that the fuzziness of a set number could be characterized by associating a membership function with each number - essentially a number lying between zero and one. Fuzzy logic is a useful tool that allows us to manipulate and work with uncertain data.

The fact that most chemical concepts are fuzzy will certainly affect the way we treat chemistry problems. In terms of practical benefits, fuzzy logic can demonstrate its value in the following areas of chemistry : fuzzy chemical reasoning such as chemometrics, data estimation, screening for hazardous chemicals and designing new agro-chemicals fuzzy sensors and fuzzy controllers.

★