

Krassimir Markov, Vitalii Velychko, Oleksy Voloshin  
(editors)

**Information Models  
of  
Knowledge**

**ITHEA<sup>®</sup>  
KIEV – SOFIA  
2010**

**Krassimir Markov, Vitalii Velychko, Oleksy Voloshin (ed.)**

**Information Models of Knowledge**

ITHEA®

Kiev, Ukraine – Sofia, Bulgaria, 2010

ISBN 978-954-16-0048-1

First edition

Recommended for publication by The Scientific Council of the Institute of Information Theories and Applications FOI ITHEA  
ITHEA IBS ISC: 19.

This book maintains articles on actual problems of research and application of information technologies, especially the new approaches, models, algorithms and methods for information modeling of knowledge in: Intelligence metasynthesis and knowledge processing in intelligent systems; Formalisms and methods of knowledge representation; Connectionism and neural nets; System analysis and synthesis; Modelling of the complex artificial systems; Image Processing and Computer Vision; Computer virtual reality; Virtual laboratories for computer-aided design; Decision support systems; Information models of knowledge of and for education; Open social info-educational platforms; Web-based educational information systems; Semantic Web Technologies; Mathematical foundations for information modeling of knowledge; Discrete mathematics; Mathematical methods for research of complex systems.

It is represented that book articles will be interesting for experts in the field of information technologies as well as for practical users.

General Sponsor: Consortium FOI Bulgaria ([www.foibg.com](http://www.foibg.com)).

Printed in Ukraine

**Copyright © 2010 All rights reserved**

© 2010 ITHEA® – Publisher; Sofia, 1000, P.O.B. 775, Bulgaria. [www.ithea.org](http://www.ithea.org) ; e-mail: [info@foibg.com](mailto:info@foibg.com)

© 2010 Krassimir Markov, Vitalii Velychko, Oleksy Voloshin – Editors

© 2010 Ina Markova – Technical editor

© 2010 For all authors in the book.

® ITHEA is a registered trade mark of FOI-COMMERCE Co., Bulgaria

**ISBN 978-954-16-0048-1**

C/o Jusautor, Sofia, 2010

## СОЗДАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ В ОБЛАСТИ ГОРЕНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ СРЕДСТВАМИ DATA MINING

**Виктор Абруков, Сергей Абруков, Елена Карлович**

**Аннотация:** Представлены возможности средств *Data Mining*, в частности искусственных нейронных сетей (ИНС) для моделирования и прогнозирования характеристик горения конденсированных систем (КС). Впервые получены вычислительные модели, позволяющие прогнозировать характеристики горения КС. Они позволяют прогнозировать профили температуры в волне горения КС, скорость горения различных по составу КС при различных давлениях и начальных температурах, определять состав КС, обеспечивающий необходимую скорость горения при заданном давлении и т.д. Описаны и проиллюстрированы методы создания таких моделей. Полученные результаты показывают, что ИНС могут рассматриваться как хорошее средство аппроксимации многомерных экспериментальных данных, позволяющее обобщать и прогнозировать связи между переменными эксперимента и теории, как быстрый инженерный калькулятор, специализированный для решения задач исследования процесса горения КС, как средство получения новых «экспериментальных» результатов и выявления новых неизвестных ранее закономерностей горения, как хорошее средство представления и хранения ранее полученных экспериментальных результатов.

**Ключевые слова:** *Data Mining*, искусственные нейронные сети, горение, вычислительные модели,

---

### Введение

К настоящему времени накоплено много экспериментальных данных по характеристикам горения различных конденсированных систем (КС). Вопрос заключается в следующем – можно ли их обобщить и на этой основе представить в виде модели, позволяющей предсказывать закономерности горения ранее не исследованных КС или для ранее не исследованных условий?

Очевидно, что такие параметры КС, условий горения и характеристики горения, как: состав КС, начальная температура образца КС, давление, максимальная температура пламени, распределение температуры в пламени, излучение пламени, скорость горения, связаны между собой. Вопрос – как мы можем обобщить эти связи?

В данной работе представляются результаты применения средств *Data Mining* (часто называемых средствами интеллектуального анализа данных) для создания многофакторных моделей обобщающих закономерности горения, выраженные в экспериментальных данных. Данная задача поставлена впервые, мы не нашли в научной литературе примеров применения *Data Mining* для решения данной задачи.

---

### Методы исследования, результаты и их обсуждение

*Data Mining* - комплекс современных средств предобработки данных, их анализа и визуализации результатов анализа. *Data Mining* включает в себя, в частности, такие средства, как: факторный и корреляционный анализ, «деревья решений», искусственные нейронные сети (ИНС), самоорганизующиеся карты Кохонена. С точки зрения создания многофакторных вычислительных моделей, ИНС, которые могут рассматриваться как универсальные аппроксиматоры многомерных функций, играют главную роль. Остальные средства служили нам для предобработки данных и для их предварительного анализа.

К настоящему времени на основе экспериментальных данных по горению конденсированных систем, взятых из научной литературы, нами получены четыре вычислительные ИНС-модели горения КС.

### 1.1. Модель «Температурный профиль - скорость горения»

Данная модель позволяет определять профиль температуры в волне горения КС через скорость горения,  $U$ , давление,  $p$ , и удельную теплоту сгорания в близповерхностном слое горящего образца,  $q$  (или максимальную температуру пламени,  $T_{\max}$ ).

Схема построения модели была следующая. Были собраны данные по температурным профилям в газовой фазе горения конденсированных систем [Зенин, 1980, Льюис, 1976], измеренным для различных систем, скоростей горения и давлений. Затем была выбрана соответствующая собранной базе данных архитектура ИНС и проведено ее «обучение». Обучение заключалось в том, что различные наборы значений скоростей горения, давления, удельной теплоты сгорания (или максимальной температуры пламени) и координат волны горения подавались на входной слой ИНС, а соответствующие значения температуры устанавливались в выходном слое ИНС и с помощью известного метода обучения ИНС – метода «обратного распространения ошибки» создавалась вычислительная ИНС модель горения.

Эта модель представляет собой модель типа «чёрного ящика», она не имеет аналитического выражения. Полученный «чёрный ящик» может использоваться для определения (предсказания) температурного профиля в газовой фазе горения конденсированных систем примерно такого же типа, для которого была собрана база данных следующим образом. Значение давления и скорости горения (они должны быть измерены) и теплота сгорания или максимальная температура (они могут быть оценены или рассчитаны) устанавливаются во входном слое ИНС. После этого «чёрный ящик» мгновенно вычисляет соответствующий этим значениям профиль температуры.

Примеры таких вычислительных моделей получены нами для смесевых КС на основе перхлората аммония и нитроцеллюлозы. Ниже представлены результаты и их обсуждение.

Таблица 1

Часть данных, использованная для создания ИНС-модели температурного профиля в газовой фазе горения смесевых КС на основе перхлората аммония.

| $U$ , см/сек | $p$ , атм | $q$ , кал/г | $x$ , мм | $T$ , °C |
|--------------|-----------|-------------|----------|----------|
| 0.2          | 5         | 110         | 0        | 400      |
| 0.2          | 5         | 110         | 0.1      | 1100     |
| 0.2          | 5         | 110         | 0.2      | 1300     |
| 0.2          | 5         | 110         | 0.3      | 1480     |
| ...          | ...       | ...         | ...      | ...      |
| 0.2          | 5         | 110         | 0.8      | 1900     |
| 0.2          | 5         | 110         | 0.9      | 1930     |
| 0.2          | 5         | 110         | 1        | 1940     |
| 0.8          | 100       | 170         | 0        | 600      |

| $U$ , см/сек | $p$ , атм | $q$ , кал/г | $x$ , мм | $T$ , °C |
|--------------|-----------|-------------|----------|----------|
| 0.8          | 100       | 170         | 0.1      | 1595     |
| ...          | ...       | ...         | ...      | ...      |
| 0.8          | 100       | 170         | 1        | 2400     |
| 0.5          | 20        | 210         | 0        | 600      |
| ...          | ...       | ...         | ...      | ...      |
| 0.5          | 20        | 210         | 0.5      | 2250     |
| 0.8          | 40        | 230         | 0        | 500      |
| ...          | ...       | ...         | ...      | ...      |

Результаты, полученные с помощью ИНС-модели, представлены в Таблице 2 и на рис. 1.

Таблица 2

Результаты проверки работы ИНС-модели для смесевых КС на основе перхлората аммония. Условия горения:  $p=40$  атм,  $Q=150$  кал/г,  $U=0.4$  см/сек.  $T$  - температура, измеренная термопарой,  $T'$  - температура, вычисленная ИНС-моделью.

| $x$ , мм  | 0   | 0.1  | 0.2  | 0.3  | 0.4  | 0.5  | 0.6  | 0.7  | 0.8  | 0.9  | 1    |
|-----------|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $T$ , °C  | 600 | 1150 | 1550 | 1650 | 1710 | 1800 | 1950 | 1980 | 2020 | 2100 | 2200 |
| $T'$ , °C | 577 | 1225 | 1454 | 1636 | 1770 | 1882 | 1982 | 2068 | 2141 | 2198 | 2242 |

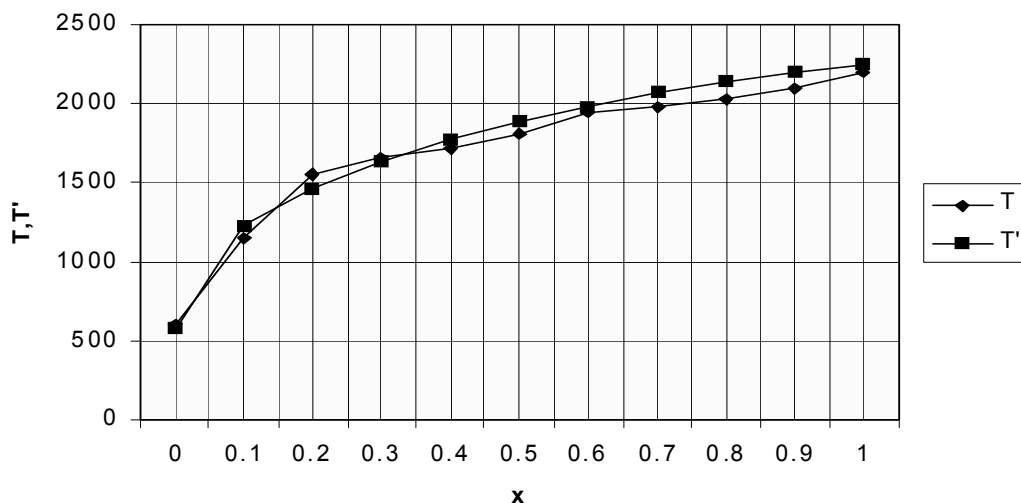


Рис. 1. Результаты проверки ИНС-модели для смесевых КС на основе перхлората аммония. Условия горения:  $p=40$  атм,  $Q=150$  кал/г,  $U=0.4$  см/сек.  $T$  - температура, измеренная термомпарой,  $T'$  - температура, вычисленная ИНС-моделью.

Другой пример данных использованных для построения ИНС-модели температурного профиля в газовой фазе горения КС представлен в табл. 3, а результаты проверки – в табл. 4 и на рис.2. Здесь, мы использовали экспериментальные данные по горению нитроцеллюлозы [Льюис, 1976].

Анализ табл. 2, 4 и рис. 1, 2 показывает, что ИНС-модель «Температурный профиль - скорость горения» позволяет предсказывать температурный профиль в газовой фазе горения КС по данным о скорости горения, давления и удельной теплоте сгорания (или максимальной температуре пламени).

По нашему мнению, этот способ получения температурных профилей может быть многообещающим в случаях, когда мы имеем пробелы в экспериментальных результатах для исследуемых КС и хотели бы заполнить их. Мы полагаем, что этот путь определения температурных профилей может рассматриваться в перспективе как уникальный инструмент для случаев, когда экспериментальные данные по профилям температуры полностью отсутствуют, но мы хотели бы иметь их оценку. Чтобы иметь возможность выполнять эту оценку, необходимо собрать экспериментальные данные по профилям температуры для разнообразных КС при различных условиях. После этого можно поставить задачу построения обобщенной ИНС-модели «Температурный профиль - скорость горения» для КС в целом.

Таблица 3: Часть данных, использованная для создания ИНС-модели температурного профиля в газовой фазе горения нитроцеллюлозы.

| $p$ , атм | $U$ , мм/сек | $T_{max}$ , °C | $x$ , мм | $T$ , °C |
|-----------|--------------|----------------|----------|----------|
| 49        | 25           | 1500           | 0        | 200      |
| 49        | 25           | 1500           | 0.1      | 790      |
| 49        | 25           | 1500           | 0.2      | 1000     |
| 49        | 25           | 1500           | 0.4      | 1270     |
| 49        | 25           | 1500           | 0.6      | 1380     |
| 49        | 25           | 1500           | 0.8      | 1400     |
| 49        | 25           | 1500           | 1.0      | 1430     |
| 49        | 25           | 1500           | 1.2      | 1450     |
| 49        | 25           | 1500           | 1.4      | 1470     |
| 42        | 22           | 1400           | 0        | 300      |
| 42        | 22           | 1400           | 0.1      | 650      |
| 42        | 22           | 1400           | 0.2      | 950      |

| $p$ , атм | $U$ , мм/сек | $T_{max}$ , °C | $x$ , мм | $T$ , °C |
|-----------|--------------|----------------|----------|----------|
| 42        | 22           | 1400           | 0.4      | 1230     |
| 42        | 22           | 1400           | 0.6      | 1300     |
| 42        | 22           | 1400           | 0.8      | 1380     |
| 42        | 22           | 1400           | 1.0      | 1393     |
| 42        | 22           | 1400           | 1.2      | 1397     |
| 42        | 22           | 1400           | 1.4      | 1400     |
| 20        | 19           | 1200           | 0        | 270      |
| 20        | 19           | 1200           | 0.1      | 470      |
| 20        | 19           | 1200           | 0.2      | 700      |
| 20        | 19           | 1200           | 0.4      | 1095     |
| 20        | 19           | 1200           | 0.6      | 1200     |
| ...       | ...          | ...            | ...      | ...      |

Таблица 4

Результаты проверки ИНС-модели для нитроцеллюлозы. Условия горения:  $p=28$  атм,  $U=2,0$  см/сек,  $T_{\max} = 1400$  °С.  $T$  - температура, измеренная термопарой,  $T'$  - температура, вычисленная ИНС-моделью.

| x, мм     | 0   | 0.1 | 0.2 | 0.4  | 0.6  | 0.8  | 1.0  | 1.2  | 1.4  |
|-----------|-----|-----|-----|------|------|------|------|------|------|
| $T$ , °С  | 250 | 580 | 850 | 1190 | 1250 | 1270 | 1300 | 1370 | 1380 |
| $T'$ , °С | 302 | 506 | 829 | 1149 | 1239 | 1283 | 1321 | 1355 | 1379 |

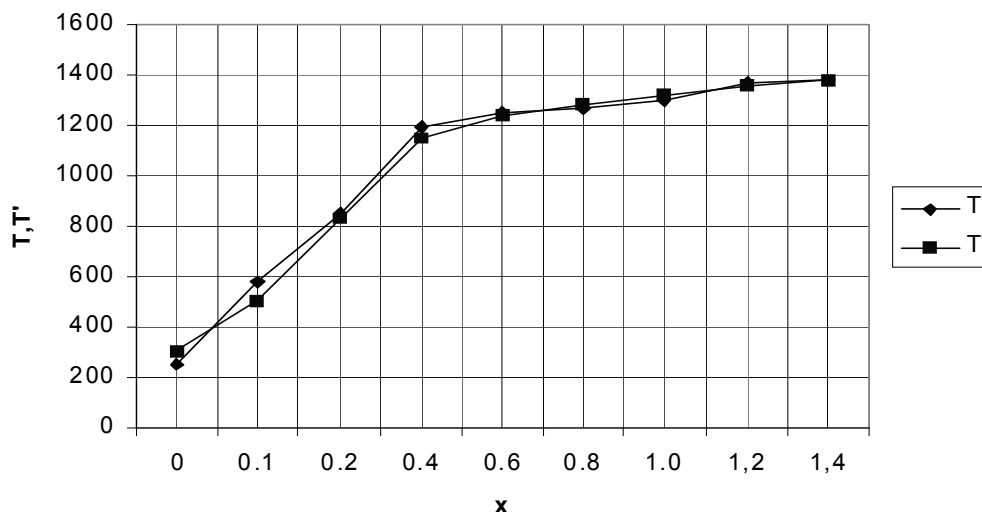


Рис. 3. Результаты проверки ИНС-модели для нитроцеллюлозы. Условия горения:  $p=28$  атм,  $U=2,0$  см/сек,  $T_{\max} = 1400$  °С.  $T$  - температура, измеренная термопарой,  $T'$  - температура, вычисленная ИНС-моделью.

## 1.2. Модель “Скорость горения – давление и состав топлива”

Данная ИНС-модель устанавливает соотношение между значением скорости горения с одной стороны, и количеством нитрата аммония и перхлората аммония, размером частиц перхлората аммония и давлением с другой стороны. Использовались данные работы [Makota, 2008]. Эта модель позволяет предсказывать значение скорости горения конденсированных систем такого типа в различных условиях.

## 1.3. Модель “Состав топлива – давление и скорость горения”

Данная ИНС-модель устанавливает соотношение между количеством перхлората аммония и размером его частиц с одной стороны и значением скорости горения, количеством нитрата аммония и значением давления с другой стороны. Для ее построения также использовались данные работы [Makota, 2008]. Эта модель позволяет предсказывать состав топлива необходимый для получения требуемой скорости горения при заданном давлении.

## 1.4. Модель “Скорость горения – давление, начальная температура, теплота взрыва монотоплива”.

Данная ИНС-модель устанавливает соотношение между значением скорости горения монотоплив способных к самостоятельному горению: гексоген (RDX), октоген (HMX), перхлорат аммония, топливо CL-20, динитрамид аммония (ADN), нитроформат гидразина (HNF) с одной стороны, и давлением, начальной температурой и теплота взрыва монотоплива с другой стороны. Эти вещества являются основными компонентами многих КС. Использовались данные работы [Atwood, 1999]. Эта модель позволяет предсказывать значение скорости горения монотоплив в различных условиях.

## Заключение

Мы полагаем, что аналогичные модели могут быть получены для различных групп КС, а в перспективе и для КС в целом и что средства Data Mining позволят существенно увеличить значение уже полученных

экспериментальных результатов, а также получить новые “экспериментальные” результаты и выявить новые неизвестные ранее закономерности горения.

Помимо чисто научных задач, это позволит облегчить решение и практически важных задач, например, задачи подбора состава топлива и поиска новых топлив для обеспечения требуемых скоростей горения и других характеристик. В перспективе, обобщенную модель горения КС в целом можно будет рассматривать как удобную в использовании базу знаний (Knowledge Data Base) закономерностей горения конденсированных систем. Часть ее в виде ИНС-моделей можно представить как своеобразный инженерный калькулятор, позволяющий мгновенно производить требуемые вычисления характеристик горения или требуемый состав КС.

Стоит также отметить интересную роль, которую могут иметь полученные модели в учебном процессе. Обобщая закономерности экспериментальных данных, данные модели позволяют в компактном виде наглядно продемонстрировать различия КС по характеристикам горения, зависимости характеристик горения от внешних и внутренних условий, и в целом в механизме горения КС.

Все четыре полученные модели будут представлены участникам конференции для их опробования, как на основе наших данных, так и на основе данных участников конференции. При представлении участниками конференции своих данных в формате MS Excel (с числом строк - примеров наборов данных от 50 до 150 и числом столбцов – входных и выходных переменных модели от 3 до 6) могут быть получены вычислительные ИНС-модели данных участников конференции. Мы приглашаем участников конференции к участию в совместных исследованиях для решения задачи создания базы знаний в области горения КС.

---

## Литература

1. [Atwood, 1999] A. I. Atwood A. I. et al. Burning Rate of Solid Propellant Ingredients, Part 1: Pressure and Initial Temperature Effect. Journal of Propulsion and Power, Vol. 15, No. 6, 1999, p. 740-749.
2. [Makota, 2008] Makota Kohga et al. Influence of AP Particle Size on Burning Characteristics of AN/AP – Based Composite Propellants. Combustion // Advancement in Energetic Materials and Chemical Propulsion, Ed. K. K. Kuo and K. Hori, New York: Begell House, Inc., 2008, pp. 491-506.
3. [Зенин, 1980] Зенин А.А. Физические процессы при горении и взрыве. М.: Атомиздат, 1980. 69 с.
4. [Льюис, 1976] Льюис Б., Пиц Р., Тейлор Р. Процессы горения. М., Гос. издат. физической и математической литературы, 1976. с. 447 – 470.

---

## Информация об авторах



**Виктор Аbruков**, Чувашский государственный университет, Московский пр., 15 Чебоксары, 428015 Россия; e-mail: [abrukov@yandex.ru](mailto:abrukov@yandex.ru)

Области научных интересов: Data Mining, искусственные нейронные сети, горение



**Сергей Аbruков**, Чувашский государственный университет, Московский пр., 15 Чебоксары, 428015 Россия; e-mail: [abrukovs@yandex.ru](mailto:abrukovs@yandex.ru)

Области научных интересов: искусственные нейронные сети



**Елена Карлович**, Чувашский государственный университет, Московский пр., 15 Чебоксары, 428015 Россия; e-mail: [lenka-buzuluk@yandex.ru](mailto:lenka-buzuluk@yandex.ru)

Области научных интересов: искусственные нейронные сети