

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки Объединенный  
институт высоких температур Российской академии наук

академик О.Ф. Петров



2021 года

## ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук на диссертационную работу Дмитриева Артема Михайловича «Кинетика горения модельных биотоплив на основе сложных этиловых эфиров»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремального состояния вещества.

Диссертация А.М. Дмитриева посвящена актуальным проблемам кинетики горения перспективных биотоплив. Процесс горения является одним из самых популярных способов получения энергии в мире. При этом особое внимание уделяется вопросам безопасности, эффективности и экологичности используемого процесса. В связи с этим всестороннее исследование химии процессов горения и окисления различных видов топлив, включая новые виды топлив, является важной фундаментальной и прикладной задачей современной науки о горении. Таким образом, данная работа, посвящённая исследованию химической кинетики горения модельных компонентов биотоплив, является, без сомнений, актуальным научным исследованием.

Диссертация содержит как результаты численных расчетов, так и экспериментальных данных. Основные выводы работы построены на сопоставлении экспериментальных данных с результатами численного моделирования с использованием детальных механизмов горения соответствующих эфиров. Автором получен большой объём новых экспериментальных данных по химической структуре пламён трёх этиловых эфиров жирных кислот (ЭЭЖК): этилацетата, этилбутаноата и этилпентаноата. Помимо этого автором предложен модифицированный кинетический механизм горения этилпентаноата, построенный на основе последних исследований кинетики горения лёгких этиловых эфиров. Разработанный механизм включает в себя стадии окисления не только этилпентаноата, но и более лёгких этиловых эфиров. Точность предложенной кинетической модели проверяется в диссертации на полученных экспериментальных данных по химической структуре пламён исследуемых эфиров при атмосферном и пониженном (50 Торр) давлении, а также на литературных данных по ламинарной скорости горения смесей этилпентаноат/воздух. Кроме того, для сравнения приводятся

результаты моделирования на основе других механизмов горения этиловых эфиров, представленных в литературе.

По результатам, полученным в диссертации, опубликованы три статьи в рецензируемых международных журналах, а также получено свидетельство о государственной регистрации базы данных.

Диссертация имеет традиционную структуру из введения, трёх глав, результатов и выводов и списка литературы, который содержит 128 наименований. Общий объём диссертации составляет 130 страниц, содержит 37 рисунков и 8 таблиц с учётом трёх приложений в конце.

Во **введении** подробно обоснована актуальности темы диссертации, сформулирована цель и задачи исследования, приводятся научные положения, выносимые на защиту, показана научная новизна, теоретическая и практическая значимость исследования, описан личный вклад соискателя в работу.

**Первая глава** посвящена литературному обзору, состоящему из трёх разделов. В первом разделе приводится подробная информация о биотопливах на основе сложных эфиров жирных кислот. В деталях описаны особенности производства и использования разных поколений биотоплив, основные преимущества и недостатки таких топлив. В последующих двух разделах главы приводится исчерпывающий обзор работ, посвящённых исследованию кинетики горения лёгких и тяжёлых ЭЭЖК.

Во **второй главе** приводится описание экспериментальных и численных методов, использованных соискателем в работе. В своём исследовании Дмитриев А.М. пользовался двумя разными установками. Для проведения экспериментов при атмосферном давлении автор использовал масс-спектрометрическую установку, расположенную в ИХКГ СО РАН, Новосибирск. Для измерений при низком давлении им была использована установка с газово-хроматографическим анализом, расположенная в лаборатории LRGP, Нанси, Франция. Автор подробно описывает системы подачи топлива, использованные горелки, методы отбора газовых проб из пламени и методики обработки данных для каждой из установок. Кроме того приводится описание термометрического метода измерения температуры пламени, использованного в работе, а также метода обработки данных. После описания экспериментальных методов приводится описание математической модели квазиодномерного ламинарного пламени, использованной для моделирования структуры исследованных пламен. Приводится общее описание структуры кинетических механизмов и подробное обсуждение детальных механизмов окисления эфиров, представленных в литературе и использованных в данной работе. В последней части главы описаны основные методы численного анализа кинетических механизмов.

**Третья глава** диссертации посвящена результатам экспериментального исследования и численного моделирования пламен исследуемых ЭЭЖК. Глава состоит из трёх разделов. В первом разделе подробно описан новый механизм горения этилпентаноата, предложенный в диссертации. Приводится анализ используемых данных для построения механизма, а также ключевые реакции и соответствующие им константы скорости, модифицированные в новом механизме. Обсуждаются ключевые отличия нового механизма от модели Дэйма для окисления этилпентаноата, представленной в литературе.

В следующем разделе приведены результаты измерений химической структуры исследуемых эфиров в сравнении с результатами численного моделирования.

Обсуждаются особенности горения разных ЭЭЖК с точки зрения химического состава основных и промежуточных продуктов горения. Подробно анализируется точность использованных механизмов в описании полученных экспериментальных данных. Особое внимание уделено обсуждению точности предложенного автором механизма. Отмечается более точное описание новой моделью максимальной мольной доли ацетилена, аллена и некоторых других лёгких интермедиатов в сравнении с предсказаниями модели Дэйма.

В последнем разделе главы приводится анализ первичных путей деструкции исследуемых эфиров в исследованных пламёнах. Подробно обсуждаются пути окисления исходного топлива и первичных интермедиатов и причины неточностей и расхождений, наблюдаемых при сравнении результатов моделирования с экспериментальными данными. Отмечается роль констант скорости реакций, модифицированных в новом механизме, в перераспределении вкладов первичных путей деструкции исходного топлива. В заключение данного раздела приводятся результаты расчётов ламинарной скорости горения смесей этилпентаноат/воздух, полученные с использованием нового механизма. Представлено сравнение полученных результатов с экспериментальными и численными данными, известными из литературы. Показано хорошее согласие предсказаний новой модели с экспериментальными данными в широком диапазоне условий. Данные, представленные в третьей главе, а также результаты и выводы, сформулированные в последней части работы, позволяют утверждать несомненную новизну и оригинальность работы.

Работа Дмитриева А.М. выполнена на высоком уровне, обладает целостностью и понятной логикой. Тем не менее, можно отметить несколько замечаний:

1. Разработанный автором кинетический механизм опирается на комплекс наиболее современных литературных данных. При этом полученные автором экспериментальные данные используются лишь для проверки адекватности предложенного механизма, тогда как, проведя соответствующий анализ чувствительности различных реакций к поведению концентраций измеряемых компонент процессов горения, автор мог бы предложить некоторые дальнейшие модификации констант скоростей ключевых реакций.
2. В работе исследуются пламена, разбавленные аргоном. Однако в практических приложениях важно учитывать возможную роль азота воздуха в кинетике происходящих реакций. К сожалению, таких исследований в работе не проведено.
3. Не совсем ясно, по какому критерию определяется точность/неточность описания экспериментального профиля мольной доли соединения той или иной моделью?
4. Предложенный в диссертации механизм не содержит реакций, соответствующих низкотемпературной области окисления эфиров, хотя представленный в литературе механизм Дэйма их содержит. Возникает вопрос, почему данные реакции не были учтены в новом механизме?

Указанные замечания не умаляют ценности работы и не снижают достоинства диссертационного исследования. Диссертация выполнена на высоком профессиональном уровне, в работе решены все поставленные научные задачи, а объём диссертации соответствует научно-квалификационной работе на степень кандидата наук. Личный вклад автора не вызывает сомнений.

На основании всего вышесказанного можно заключить, что диссертация Дмитриева Артема Михайловича «Кинетика горения модельных биотоплив на основе сложных этиловых эфиров» по уровню выполнения, объёму, научной новизне, значимости полученных результатов и выводов представляет собой полноценное законченное научное исследование, соответствующее требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе п. 9 Положения о порядке присуждения учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года. Автор работы, Дмитриев А.М., заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремального состояния вещества.

Диссертационная работа заслушана и обсуждена на межотдельском семинаре ОИВТ РАН (протокол № 01-1-21 от 26 января 2021 года).

Отзыв подготовил заведующий лабораторией №19. – неравновесных процессов  
ОИВТ РАН

профессор, доктор физ.-мат. наук  
по специальности 01.04.08 – физика плазмы  
Еремин Александр Викторович



Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2.  
<https://www.jiht.ru/>, E-mail: [webadmin@ihed.ras.ru](mailto:webadmin@ihed.ras.ru)  
Телефон: (495) 485-8345. Факс: (495) 485-99-22.

Подпись Еремина А.В. заверяю:  
Учёный секретарь ОИВТ РАН, д.ф.-м.н.  
Амиров Равиль Хабибулович

