

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Трегубова Дмитра Георгійовича

«Розвиток наукових основ прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних»,
яку подано на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 21.06.02 – пожежна безпека

Актуальність дисертаційної роботи. Надана на експертизу дисертаційна робота Трегубова Д.Г. присвячена дослідженню методів підвищення точності розрахунків розрахункового прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних. Основна увага приділена впливу на ці параметри надмолекулярної будови речовини. Під таким кутом точки зору фізико-хімічні властивості речовин досліджено недостатньо. Зазвичай для прогнозування виникнення, поширення та припинення горіння застосовують елементи теплової, пероксидної та ланцюгової теорій горіння з залученням математичного апарату для опису матеріального та теплового балансу. Автором справедливо зазначено, що ці підходи зберігають свою актуальність, але неповнота застосованих моделей в означеному напрямку призводить до похибок незалежно від глибини врахування супутніх фізичних та хімічних процесів.

Трегубовим Д.Г. на основі аналізу особливостей зміни фізико-хімічних параметрів у гомологічних рядах вуглеводнів та їх похідних зроблено обґрунтований висновок, що наявні пульсаційні відхилення від плавності неможливо описати з точки зору лише молекулярної структури, параметри якої у гомологічних рядах змінюються лінійно. Найпростіший шлях описати пульсаційність зміни параметру пожежовибухонебезпечності. – це знайти фізико-хімічний параметр, який змінюється синхронно. Але наведений аналіз 10 фізико-хімічних параметрів у порівнянні з параметрами виникнення горіння показав відсутність абсолютних кореляцій. Наприклад, типовою парною ко-

реляцією є розрахунок температури спалаху на підставі значень температури кипіння, але ці залежності не однакові, а лише подібні. Це вказує на умовність та апроксимаційний характер такого підходу та обумовлює необхідність пошуку більш точних кореляцій. Другим шляхом опису пульсаційності автор бачить опис геометричних параметрів надмолекулярної будови у вигляді довжини кластерів, які характеризуються різни координаційним числом та точкою кластеризації за довжиною молекули. Це, у свою чергу потребує розробки теоретичних основ та практичних методик моделювання таких структур. Такий підхід дозволить подолати ряд суттєвих недоліків існуючих систем прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних.

Трегубовим Д.Г. вперше запропоновано ряд розрахункових методик для прогнозування параметрів виникнення, поширення та припинення горіння речовин органічного походження на підставі двох розглянутих шляхів вирішення сформульованої проблеми. Автором досягнуто в обох напрямках підвищення кореляції прогнозування, але більш перспективним виглядає розвиток методології врахування надмолекулярної будови речовини. Таким чином, створення наукових основ прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних, є актуальною проблемою, вирішення якої є передумовою науково-технічного прогресу у сфері пожежної безпеки.

Дисертаційна робота виконувалась в рамках Програми забезпечення пожежної безпеки на 2003–2010 роки (постанова КМУ від 01.07.2002 р. №870), Державної цільової соціальної програми забезпечення пожежної безпеки на 2011–2015 роки (розпорядження КМУ від 29.12.2010 №2348-р), під час виконання науково-дослідної роботи «Розробка електронного посібника з «Теорії розвитку та припинення горіння»» (ДР № 0105U007386) за планом Університету цивільного захисту України, у якій здобувач був виконавцем (2007–2008 роки), та в межах «Договору про співробітництво та наукове консультування» від 03.12.2024 №16 між НУЦЗ України та ІЕРТ

НАН України.

Характеристика змісту дисертаційної роботи.

Дисертаційна робота складається анотації, змісту, переліку умовних скорочень, вступу, 6 розділів, загальних висновків, списку використаних літературних джерел з 336 найменувань і 2 додатків; загальний обсяг дисертації становить 510 сторінок (з них 439 основного тексту), яка містить 40 таблиць, 82 рисунки та 112 формул..

У *вступі* автор обґрунтував актуальність теми дисертаційної роботи; показав її зв'язок з науковими програмами, планами, темами, сформулював мету роботи та задачі досліджень, відобразив наукову новизну одержаних результатів і їх практичне значення, підкреслив особистий внесок та апробацію результатів дослідження.

У *першому розділі «Сучасний стан проблеми прогнозування фізико-хімічних параметрів та пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних»* розглянуто особливості побудови та точності сучасних методик прогнозування фізико-хімічних параметрів та пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних. Найпростішим шляхом прогнозування є застосування парних кореляцій. Показано, що найбільша точність розрахунків досягається за умови врахування трьох рівнів деталізації молекулярної будови за машинних методів розрахунку з використанням штучного інтелекту.

На основі аналізу послідовних рівнів формування фізико-хімічних параметрів речовин від внесків атомарного стану до параметрів пожежовибухонебезпечності автором показано, що найменш дослідженим рівнем є другий, який характеризує надмолекулярну будову та не має чітких розроблених характеристик, які можна застосувати у практичних розрахунках. Тому напрямок створення відповідних методик з формуванням параметрів кластерної будови речовини автор вважає перспективним.

Водночас у роботі звернуто увагу, що під час опису процесів у полум'ї за пероксидною та ланцюговою теоріями окиснення йдеться про існування гідро- та алкіл пероксидів, а під час опису перших стадій фізичного та хіміч-

ного самозаймання говорять про утворення пероксидних комплексів, але надалі у розрахунках ці стадії ніяк не враховано. Автор висловлює думку, що саме особливості проміжних пероксидних структур визначають перебіг виникнення та поширення горіння. Важливим висновком з цього є необхідність моделювання кластерних структур під час ініціювання горіння з побудовою на цій основі методик прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних.

У розділі 2 «Теоретичне дослідження взаємозв'язку параметрів виникнення горіння з фізико-хімічними властивостями та надмолекулярною будовою речовин органічного походження» на основі аналізу зміни 10 фізико-хімічних властивостей у гомологічних рядах *n*-алканів та *n*-спиртів показано наявність пульсаційності від плавності залежностей, які повинні були мати або виключно лінійний, або експоненційний характер пропорційно до тенденції збільшення молекули у гомологічному ряду. Автор доводить, що існуючі пояснення такої невідповідності є непереконливими, тому у роботі запропоновано методики прогнозування надмолекулярної будови речовин у вигляді димерів або кластерів з більшим координаційним коефіцієнтом, які відрізняються точкою кластеризації за довжиною молекули, тому довжина кластеру виявляється не завжди пропорційною до довжини молекули. Тим не менш у практичних розрахунках є поширена тенденція застосування парних кореляцій, але наведений аналіз демонструє, що жоден з фізико-хімічних параметрів не поводить себе ідентично до іншого, тому такий підхід є значним спрощенням з втратою точності прогнозування.

Таким чином, автором виділено два шляхи для дослідження – опосередковане або пряме врахування надмолекулярної будови. Дослідження за першим шляхом дозволили встановити деякі парні кореляції які працюють з високою точністю, але без відбиття пульсаційності залежності у гомологічному ряду. Дослідження за другим шляхом дозволили розробити показник «легкості плавлення» як функцію довжини та молярної маси кластеру, на підставі чого у роботі розроблено математичні залежності для прогнозування

температур плавлення, густини рідкого стану та розчинності у воді та отримати для представників різних гомологічних рядів єдині плавні залежності. Отримані залежності у зворотному порядку розрахунку дозволяють прогнозувати будову кластеру для різних станів речовини.

У розділі 3 «Розробка науково-обґрунтованих методик встановлення параметрів запобігання та виникнення горіння вуглеводнів та їх похідних» наведено низку досліджень в області розрахункового прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності органічних речовин в різних агрегатних станах та за умов різних видів виникнення горіння з опосередкованим врахуванням надмолекулярної будови.

У результаті проведених досліджень автором розроблено нові методики розрахунку температури спалаху та температурних меж індивідуальних речовин, їх неазеотропних сумішей та у водних розчинах. Розроблено критерій негорючості водного розчину: існує така температура та вміст води, за яких концентрація її пари є флегматизуючою. Розроблено формули для розрахунку енергій запалювання та насичення з врахуванням зміни концентраційних меж та температури середовища. Розроблено нову методику визначення середньої довжини молекули та універсальну формулу розрахунку температур самоспалахування для масиву з 350 вуглеводнів та їх похідних. Удосконалено прилад диференційно-термічного аналізу для оцінки вибухонебезпечності аерозолів твердих матеріалів та їх схильності до самозаймання.

У четвертому розділі «Обґрунтування методології ідентифікації надмолекулярної будови речовин органічного походження для умов ініціювання горіння» проведено обґрунтування наявності надмолекулярних структур у полум'ї на стадії ініціювання горіння та пошук можливих шляхів її врахування.

Під час проведеного аналітичного дослідження автором прийнято до уваги, що за умов ініціювання полум'яного горіння, як і для самозаймання скупчень твердих речовин, утворюються пероксидні сполуки або комплекси. Тому у роботі було проаналізовано параметри пожежовибухонебезпечності

на предмет осциляційності, як це має місце для конденсованого стану речовини. Значну осциляційність виявлено для наступних параметрів: мінімальна енергія запалювання, нормальна швидкість поширення полум'я, прискорення зміни температур самоспалахування та спалаху. Також, виявлено явище азеотропності для самоспалахування сумішей, що свідчить про їх кластерну будову. Для самоспалахування та вибуху вибухової речовини запропоновано модель виникнення як кооперативний процес налаштування надмолекулярної будови з наступним розкладанням. Модуючим параметром для цих процесів є еквівалентна довжина найменшого кластеру. У роботі передбачено механізми кластеризації: 1) кластеризується вуглеводень, а потім йде пероксидна кластеризація; 2) молекула горючої речовини кластеризується у вигляді пероксидного полімеру.

У розділі 5 «Розробка методу прогнозування пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних шляхом моделювання надмолекулярних пероксидних структур процесів вибуху» представлені результати розробки моделювання пероксидних кластерів для процесів ініціювання горіння та прогнозування на цій основі деяких параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних.

Автором вперше здійснено моделювання пероксидних кластерів алканів для умов самоспалахування та різних концентраційних меж виникнення та поширення горіння. На цій підставі з використанням введеного раніше показника «легкості плавлення» у роботі розроблено формули для розрахунку температур самоспалахування та антидетонаційного коефіцієнту, а також розроблено показник схильності до детонації, який за порівнянням з «1» дозволяє відокремити вибухові й невибухові речовини та прогнозувати швидкість детонації вибухових речовин. Виникнення під час ініціювання горіння важких надмолекулярних структур, на думку автора, може призвести до процесів квазіконденсації у підготовчій зоні фронту полум'я. У роботі на підставі раніше розроблених залежностей спрогнозовано, що температури фазового переходу кластерів n-алканів наявні у підготовчій зоні полум'я. Тоді вимога

умов конденсації у цільну мономолекулярну плівку дає товщину фронту полум'я 0,01 мм та радіус мінімальної незгасаючої сфери 0,03 мм, що близько збігається з результатами інших досліджень фронту полум'я.

У шостому розділі «Розробка рекомендацій щодо зниження пожежовибухонебезпечності речовин органічного походження під час обертання та зберігання» наведено рекомендації щодо застосування розроблених методик у практичних розрахунках, а також оцінено роль надмолекулярних структур під час гасіння органічних рідин плавучими засобами на основі піноскла.

Автор у роботі сформулював, що для припинення горіння рідин необхідно ізолювати та (або) охолодити їх поверхню, наприклад, шляхом подавання плавучого піноскла. Як мету таких дій прийнято досягнення теоретичного коефіцієнта сповільнення випаровування, який відраховується від умови кипіння до умови неможливості спалаху пари. Охолодження поверхні піносклом або задовольняє цю вимогу, або залишає частку, яку можна забезпечити ізолюванням. Базовою властивістю піноскла у роботі прийнято його плавучість, яка визначає частки ізолюючої та охолоджуючої дії, а також несучу здатність. У роботі експериментально доведено, що додавання наступного шару гелю покращує ізолювання, змочування водою – охолодження. Змочування водою зменшує вогнегасний шар на 2 см, додаткове подавання гелю – ще на 2 см. Але за наведеними експериментальними результатами додавання гелю виявилось для гасіння полярних рідин у 10 разів менш ефективним, ніж для неполярних. Для спиртів отримано вогнегасний шар сухого піноскла як і у попередніх роботах для алканів з близькою температурою спалаху. Розроблено формулу, яка прогнозує вогнегасний шар піноскла на підставі температур спалаху. Зволожене піноскло охолоджує гарячу поверхню у 5 разів краще, ніж сухе, і забезпечує гасіння н-додекану і н-октанолу з температурами до 160 °С. Вогнегасний шар піноскла корелює більше не з температурами кипіння або спалаху, а з модифікованою довжиною кластерів.

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертаційній роботі.

Автор розуміє проблему, що розглядається у дисертації, та коректно формулює її постановку. Кількість наукових завдань відповідає кількості розділів та основних висновків. Наукові положення та рекомендації що сформульовані в висновках за розділами та *основних висновках дисертації* є науково-обґрунтованими та записані в логічному порядку відповідно результатів аналізу, проведених теоретичних та експериментальних досліджень, а також зроблених висновків. Також ступінь обґрунтованості наукових положень підтверджується змістовним аналізом вітчизняних та закордонних літературних джерел, відповідністю методів поставленими в роботі меті і задачі досліджень, достатнім об'ємом експериментального матеріалу, задовільною збіжністю результатів, а також їх поширеною апробацією з практичним впровадженням.

Наукова новизна одержаних у дисертації результатів полягає у створенні наукових основ прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних. Під час проведених досліджень було *вперше* впроваджено у практичні розрахунки нові наукові принципи врахування надмолекулярної будови речовини та на цій основі низку розрахункових залежностей для прогнозування параметрів виникнення горіння.

Здобувачем *вперше* отримано наступні науково обґрунтовані результати:

1. Вперше обґрунтовано необхідність врахування у розрахунках параметрів пожежовибухонебезпечності речовин їх надмолекулярну будову та розроблено кластерну модель структурної одиниці речовини вуглеводнів, а також показник «легкості плавлення», що дозволило описати осциляційність залежностей.

2. Вперше розроблено методики розрахунку характерних температур неазеотропних сумішей горючих рідин та критерій негорючості суміші горючої й негорючої рідин, що дозволило спростити практичні розрахунки параметрів пожежовибухонебезпечності рідин.

3. Вперше розроблено математичну залежність, яка пов'язує умови під

час запалювання повітряних сумішей іскрою як взаємозв'язок мінімальної енергії запалювання, концентраційних меж поширення полум'я, ненасиченості джерела запалювання, температури системи; розроблено нову методику прогнозування температур самоспалахування повітряних сумішей вуглеводнів та їх похідних, що дозволило уточнити прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності

4. Обґрунтовано можливість утворення, методологію моделювання надмолекулярних пероксидних структур під час ініціювання горіння вуглеводнів, розроблено схеми таких структур для різних умов виникнення горіння, показано можливість їх конденсації у підготовчій зоні полум'я, що створило новий базис для розрахунку параметрів пожежовибухонебезпечності.

5. Вперше визначено залежності для опису процесів кластеризації у полум'ї, температур самоспалахування, антидетонаційного коефіцієнта алканів, показника схильності до детонації вибухових речовин на підставі значень еквівалентних довжин пероксидних кластерів та кількості асоційованих молекул кисню, що дозволило прогнозувати та визначати умови пожежовибухонебезпечності.

6. Вперше оцінено необхідний баланс ізолюючих та охолоджуючих властивостей вогнегасних систем на основі піноскла під час гасіння горючих рідин на підставі досягнення теоретичного коефіцієнта сповільнення випаровування з врахуванням осциляційності властивостей у гомологічних рядах за рахунок опору на модифіковану довжину кластеру, що дозволило уточнити умови припинення горіння таких рідин.

Під час проведених наукових досліджень автором удосконалено установку диференційної скануючої калориметрії та пристосовано її для прогнозування параметрів теплового самозаймання. Крім того, у роботі *набули подальшого розвитку* дослідження кореляційних зв'язків для вуглеводнів між фізико-хімічними параметрами різного походження; обґрунтування осциляційності фізико-хімічних параметрів речовини; режими пожежогасіння рідких вуглеводнів та їх похідних плавучими вогнегасними системами на основі піноскла. Отрима-

ні результати відкривають нові шляхи для розуміння та прогнозування параметрів пожежовибухонебезпечності вуглеводнів та їх похідних, що актуально як загальнонаціональному, так і світовому рівні вирішення поставлених завдань.

Практичне значення отриманих результатів. Результати, одержані здобувачем, є науковою основою спрощення та підвищення збіжності прогнозування деяких параметрів виникнення, припинення горіння та пожежогасіння: температур спалаху температурних меж поширення полум'я, температур самоспалахування як індивідуальних органічних речовин, так і їх сумішей, у тому числі з негорючими компонентами; мінімальної енергії запалювання у взаємозв'язку з температурою системи, концентраційними межами та енергією насичення; температур самонагрівання та часу індукції до теплового самозаймання скупчень твердих матеріалів; антидетонаційного коефіцієнту вуглеводнів; показника схильності до детонації та швидкості детонації вибухових речовин; коефіцієнту сповільнення випаровування та вогнегасних шарів засобів на основі піноскла під час гасіння полярних рідин.

Повнота викладу основних результатів дисертаційної роботи в опублікованих працях. Основні результати роботи викладено в 1 монографії, 5 наукових статтях у виданнях, що входять до наукометричної бази Scopus, 20 статтях у фахових наукових виданнях України категорії В та 1 патенті на винахід, а також оприлюднено на 24 конференціях та у 9 наукових працях, які додатково відображають наукові результати дисертації. Проведений аналіз публікацій Трегубова ДГ., які зараховано за темою дисертації, показав, що у цих роботах повною мірою відображено результати даного дослідження. У цьому переліку відсутні роботи, які не відносяться до теми дисертаційної роботи. Повноту відображення результатів дослідження та їх представлення можна оцінити як достатні.

Зміст **реферату** відповідає змісту дисертації.

Аналіз дисертаційної роботи на відсутність (наявність) академічного плагіату, фабрикацій, фальсифікацій. Проведений аналіз змісту дисертаційної роботи показав, що викладені дані містять результати оригіналь-

них досліджень, усі положення роботи обґрунтовано, аргументовано, чітко та грамотно викладено; дані та результати інших наукових досліджень, використані у даній роботі, мають актуальні посилання на відповідні літературні джерела. наукових праць, зарахованих за темою дисертації показав, що у 6 з них Трегубов Д.Г. є одноосібним автором, в інших – першим автором, в одній роботі – другим та містять оригінальні дослідження.

По дисертаційній роботі є наступні зауваження:

1. В літературному огляді мало уваги приділено аналізу гасіння пожеж класу В різними засобами.

2. З наведеного тексту не завжди зрозуміло обмеження застосування розроблених розрахункових та експериментальних методик.

3. Під час опису розробленого методу для диференційної скануючої калориметрії для обраних умов завантаження проб за об'ємом не чітко описано методику врахування різниці між пробами в уявній густині та теплоємності.

4. У чому особливість ефекту азеотропності для температури самоспалахування?

5. У тексті зустрічається фраза «розроблено формулу» - краще «одержано, отримано чи запропоновано»?

6. В описі певних параметрів та процесів зустрічаються стилістичні помилки, наприклад, «кореляція вогнегасного шару піноскла з іншими властивостями» - не зрозуміло за яким параметром.

7. У роботі відсутнє обґрунтування вибору якісного і кількісного складу гелеутворюючої системи.

8. У роботі введено багато нової термінології: температурна точка самофлегматизації, стехіометрична температура, показник «легкість плавлення», критерій негорючості, довжина кластеру тощо. Чи необхідно було вводити нові поняття?

9. Чи коректно застосовувати такі терміни як «прискорення температури спалаху та самоспалахування»?

Висунуті зауваження не зменшують наукової та практичної значущос-

ті, повноти викладення даної дисертаційної роботи.

Загальний висновок по дисертаційній роботі.

За актуальністю теми, науковою новизною результатів, їх практичною цінністю і повнотою публікування дисертаційна робота відповідає паспорту спеціальності 21.06.02. – пожежна безпека, а саме – п.п. 3 та 4, «Деякі питання присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17.11.2021 р. № 1197, а саме – п.п. 6–9, а її автор Трегубов Дмитро Георгійович заслуговує присудження наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 21.06 – пожежна безпека.

Професор кафедри цивільного захисту
Львівського державного університету
безпеки життєдіяльності,
доктор технічних наук,
професор



В.В. Ковалишин

«28» квітня 2025 року

