

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновку, переліку посилань з 57 найменувань, 2 додатків і містить 20 рисунків, 2 таблиці. Повний обсяг магістерської дисертації складає 105 сторінки, додатки - 16 сторінок.

Актуальність теми. Процеси взаємодії металів з молекулярних газів представляють важливий практичний інтерес, в зв'язку з проблемою створення нового покоління жаростійких матеріалів для роботи в екстремальних умовах. Згадані процеси проходять у відкритих системах далеко від термодинамічної рівноваги і характеризуються різноманітним поведінкою. Комп'ютерне моделювання цих процесів дозволяє дослідити поведінку системи газ-метал без необхідності проведення експерименту, що значно знижує собівартість і небезпеку дослідження.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Дисертаційна робота магістра виконувалась у Інституті проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, в рамках теми «Ш-2-17; Дослідити закономірності ущільнення та формування гетеро фазної мікроструктури при реакційному рідко фазному спіканні багатокomпонентних металічних систем; створити функціональні спеченені матеріали з підвищеними характеристиками електроерозійної, ізносо - та жаростійкості»

Метою є розробка комп'ютерно-інтегрованої процедури для моделювання процесів взаємодії активних молекулярних газів з поверхнею металічних матеріалів для встановлення механізмів формування функціональних властивостей зокрема жаростійкості в екстремальних умовах експлуатації при високих температурах.

Об'єктом дослідження є Комп'ютерно-інтегровані технології дослідження процесів окиснення металів в умовах термодинамічної нестійкості його оксидів.

Для реалізації поставленої мети були сформульовані наступні **завдання дослідження**, що визначили логіку дослідження та його структуру:

1. Дослідити закономірності та особливості процесу окиснення заліза в області термодинамічної нестійкості його оксидів.
2. Експериментально дослідити характер зміни температури
3. Розробити математичну модель процесу окиснення заліза в області термодинамічної нестійкості вищих оксидів.

4. Провести параметричну ідентифікацію математичної моделі.
5. Розробити комп'ютерно-інтегровану процедуру для дослідження процесу окиснення заліза.

6. Розробити програмний модуль для підтримки процедури комп'ютерно-інтегрованого розрахунку досліджуваної системи

Предметом досліджень. Розробка процедури комп'ютерно-інтегрованого дослідження нерівноважних і рівноважних металічних реагуючих систем, їх функціональної поведінки в екстремальних умовах під дією високих температур.

Методи дослідження: експериментальні методи визначення показників стану порошкових реагуючих систем, система комп'ютерного моніторингу температур, математичне моделювання.

Наукова новизна одержаних результатів. Найбільш суттєвим науковими результатами магістерської дисертації є:

- Вперше використовувалась математична модель з розподіленими параметрами.
- Вперше розроблено програмний продукт для вирішення моделі з розподіленими параметрами

Практичне значення одержаних результатів визначається тим, що запропонований програмний продукт забезпечує можливість комп'ютерного моделювання системи кисень-залізо в умовах термодинамічної нестійкості. Це дозволяє значно спростити процес дослідження системи за рахунок відсутності необхідності проведення реального дослідження об'єкту.

Апробація результатів дисертації. Основні положення роботи доповідались і обговорювались на 3 конференціях.

Публікації. Наукові положення дипломної роботи опубліковано у 5 роботах.

Ключові слова. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ, КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІЙ РОЗРАХУНОК, ТЕРМОДИНАМІЧНА НЕСТІЙКІСТЬ, ОКИСНЕННЯ ЗАЛІЗА, МЕТОД КІНЦЕВИХ РІЗНИЦЬ, МЕТОД ГРА, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, MATLAB.