

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ



بررسی متغیرها در طراحی سیستم راهگاهی کف ریز در ریخته گری آلیاژ A356

نکارش
زهراسادات نقابی

استاد راهنمای: دکتر سید مهدی میراسماعیلی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته مهندسی مواد

بهمن ماه ۱۳۹۰



بسمه تعالیٰ

دانشگاه تربیت دین شهید رجایی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب زهراسادات نقابی متعهد می شوم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این پژوهش از آنها استفاده شده است، مطابق با مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان نامه قبل از احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است. در صورت اثبات تخلف (در هر زمان) مدرک تحصیلی صادر شده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه تربیت دین شهید رجایی می باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو

امضاء

تقدیم به آمان که مؤمن اند

به سر بلندی این وطن.

تشکر و قدردانی

سپاس خدای را که حق شناسی او بالاتر از حد ستایشگران است و نعمت هایش فوق اندیشه شمارشگران. بر خود لازم می دانم که صمیمانه ترین تشکر و قدردانی خود را نسبت به آقای دکتر سید مهدی میراسماعیلی، استاد راهنمای ارجمند که با نور علمشان، مسیر تحقیق را برایم روش نمودند، داشته باشم. از آقای مهندس سعادتی و مهندس کلانتر به خاطر راهنمایی های بی شائبه شان در طول پژوهش تشکر و قدردانی می نمایم.

همچنین از کمک های جناب آقای مهندس رشنو و تمام عزیزانی که در مراحل مختلف انجام این تحقیق از کمک ها و نظرات ارزنده ای خود دریغ نکرده اند، نیز سپاسگزارم.

چکیده :

امروزه روش های سعی و خطا برای دستیابی به طرح صحیح و بهینه از سیستم راهگاهی در ریخته گری فلزات که در گذشته به صورت عملی انجام می شد به صورت عددی و به کمک نرم افزارهای کامپیوترا انجام می گیرد. در این پژوهش سیستم های راهگاهی کف ریز به کمک نرم افزار FLOW3D به گونه ای طراحی شده است که مذاب A356 بدون تلاطم وارد قالب شود. سپس ابعاد سیستم راهگاهی طراحی شده به کمک نرم افزار، در محیط آزمایشگاهی نیز شبیه سازی شده است به گونه ای که روند حرکت مذاب درون قالب از دریچه ای که به عنوان دریچه ای بازدید تعیین شده، قابل مشاهده و فیلم برداری می باشد.

در نهایت نتایج آزمایشات عملی با نتایج به دست آمده با استفاده از نرم افزار FLOW3D مقایسه می شود که به طور کلی می توان گفت پاره ای از نتایج به دست آمده از این قرارند:

- ۱- بهینه شبیه برای راهگاه بار ریز، شبیه ۱ درجه می باشد.
- ۲- بهینه شبیه برای چاله پای راهگاه، شبیه ۹ درجه می باشد.
- ۳- بهینه شبیه برای گوه ای انتهای راهبار، شبیه ۶۵ درجه می باشد
- ۴- در صورت استفاده از چند راهباره، به منظور ورود همزمان مذاب از راهباره ها به محفظه ای قالب، حتماً باید در زیر راهباره ها کاهش سطح مقطع راهبار را داشته باشیم.
- ۵- افزایش سطح مقطع راهگاه بار ریز از مقدار بهینه باعث متلاطم شدن جریان مذاب درون محفظه ای قالب می گردد.
- ۶- تغییرات جزئی سطح مقطع راهباره سبب متلاطم شدن مذاب نمی شود.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی ، سیستم راهگاهی ، FLOW3D ، جریان مذاب

فهرست مطالب

۱.....	فصل اول: مقدمه
۲.....	۱-۱- مقدمه
۵.....	فصل دوم: مروری بر منابع
۶.....	۲-۱- مقدمه ای بر جریان سیال
۶.....	۲-۲- متدهای پیشگویی
۷.....	۲-۳- امتیاز یک محاسبه‌ی تئوری
۷.....	۲-۳-۱- هزینه‌ی کم
۷.....	۲-۳-۲- سرعت
۷.....	۲-۳-۳- اطلاعات کامل
۷.....	۲-۳-۴- توانایی شبیه سازی شرایط واقعی
۸.....	۲-۳-۵- توانایی شبیه سازی شرایط ایده‌آل
۸.....	۲-۴- نارسایی‌های محاسبه‌ی تئوری
۸.....	۲-۵- انتخاب متدهای پیشگویی
۱۰.....	۲-۶- اصول حرکت سیال
۱۱.....	۲-۷-۱- مبانی فیزیکی شبیه سازی حرکت سیال
۱۲.....	۲-۷-۲- قانون بقای جرم
۱۲.....	۲-۷-۳- معادلات بقای مومنت
۱۴.....	۲-۷-۴- قانون بقای انرژی
۱۴.....	۲-۷-۵-۱- معادله برنولی
۱۵.....	۲-۷-۵-۲- معادله تریپچلی
۱۷.....	۲-۷-۶- شبکه بندی
۱۹.....	۲-۷-۷- شرایط مرزی
۱۹.....	۲-۷-۸- روش حل عددی
۲۰.....	۲-۷-۹- روش اجزا محدود
۲۱.....	۲-۷-۱۰- روش اختلاف محدود
۲۱.....	۲-۷-۱۱- روش حل معادلات

۱۱-۱-۱-۱-۱-۱-۱-۲	روش حل تفکیکی	۲۱
۱۱-۱-۱-۱-۲	روش حل پیوسته	۲۲
۱۱-۱-۳-خطی سازی : روش ضمنی در برابر روش صحیح	۲۳	
۱۱-۱-۳-۱-۱-۱-۲	روش ضمنی	۲۳
۱۱-۱-۳-۲-۱-۱-۲	روش صریح	۲۳
۱۲-۱-۲-۱-۲-۱-۲	تعیین سطح آزاد	۲۳
۱۲-۱-۲-۲-۱-۲-۲	VOF روش	۲۴
۱۲-۱-۲-۲-۲-۱-۲-۲	MAC روش	۲۶
۱۳-۱-۲	تجزیه و تحلیل داده ها	۲۶
۱۴-۱-۲	مقدمه مدلسازی کامپیوترا فرایند ریخته گری	۲۷
۱۵-۱-۲	ساختار نرم افزار شبیه سازی	۲۷
۱۶-۱-۲	فرایندهای ریخته گری	۲۹
۱۶-۱-۲-۱-۲	ریخته گری در قالب های ماسه ای	۲۹
۱۶-۱-۲-۲-۱-۲	ریخته گری مداوم	۳۰
۱۶-۱-۲-۳-۱-۲	ریخته گری دقیق	۳۱
۱۷-۱-۲	مدلسازی فرآیندهای ریخته گری	۳۲
۱۸-۱-۲	سیستم راهگاهی	۳۳
۱۹-۱-۲	فیلم های سطحی مذاب آلیاژهای آلومینیوم	۳۵
۱۹-۱-۱-۲	تأثیر فیلم های سطحی بر تنش سطحی	۳۵
۲۰-۱-۲	مخلوط شدن فیلم های سطحی با توده های مذاب	۳۶
۲۰-۱-۲-۱-۲	طغیان سطحی	۳۶
۲۰-۱-۲-۲-۱-۲	تلاطم سطحی	۳۸
۲۱-۱-۲	تئوری سرعت بحرانی	۳۹
۲۱-۱-۲-۱-۲	تئوری مذاب گسترده	۳۹
۲۲-۱-۲	ارتفاع بحرانی سقوط مذاب	۴۱
۲۳-۱-۲	عوامل مؤثر بر سرعت بحرانی	۴۲
۲۴-۱-۲	تضمین سلامت قطعه بر اساس سرعت بحرانی حداقل و حدکثر	۴۳
۲۵-۱-۲	اجزای اصلی سیستم راهگاهی	۴۵
۲۶-۱-۲	أنواع سیستم های راهگاهی	۴۵

۱-۲۶-۲	- سیستم فشاری	۴۶
۲-۲۶-۲	- سیستم غیرفشاری	۴۷
۲-۲۶-۲	- سیستم غیرفشاری/فشاری	۴۸
۲-۲۶-۲	- انتخاب بین سیستم فشاری و غیرفشاری	۴۸
۲-۲۶-۲	- سیستم راهگاهی جدید بر اساس توری سرعت بحرانی	۴۹
۲-۲۶-۲	- انتخاب سیستم راهگاهی بر اساس حساسیت و چگالی اکسید مذاب	۴۹
۲-۲۷-۲	- ضربی تخلیه	۵۱
۲-۲۸-۲	- طراحی حوضچه بارریز	۵۲
۲-۲۹-۲	- طراحی راهگاه بارریز	۵۳
۲-۳۰-۲	- طراحی حوضچه پای راهگاه	۵۵
۲-۳۱-۲	- طراحی راهبار	۵۶
۲-۳۲-۲	- طراحی راهباره	۵۷
۲-۳۳-۲	- تله سرباره	۶۰
۲-۳۴-۲	- جمع بندی	۶۱
۶۲	فصل سوم: روش تحقیق	
۶۳	۱- مقدمه	
۶۴	۲- معرفی نرم افزار FLOW3D	
۶۵	۳- معرفی آلیاژ A356	
۶۷	۴- طراحی سیستم راهگاهی	
۷۱	فصل چهارم: نتایج و تحلیل آنها	
۷۲	۴- طراحی سیستم راهگاهی	
۷۲	۴-۱- بررسی تأثیر شیب راهگاه بارریز	
۷۵	۴-۲- بررسی تأثیر شیب حوضچه پای راهگاه	
۷۶	۴-۳- بررسی تأثیر شیب گوه ی انتهای راهبار	
۷۹	۴-۴- بررسی تأثیر طرح کلی راهبار	
۸۰	۴-۵- بررسی تأثیر سطح مقطع راهگاه بارریز	
۸۲	۴-۶- بررسی تأثیر ارتفاع چاله پای راهگاه بارریز	
۸۳	۴-۲- آزمایشات عملی	
۸۵	۴-۱- بررسی تأثیر ابعاد سطح مقطع راهباره	

۸۷.....	۴-۲-۲-بررسی تأثیر ارتفاع راهگاه باربریز
۸۹.....	۴-۲-۳-بررسی تأثیر تعداد راهباره ها
۹۱.....	فصل پنجم: نتیجه گیری
۹۲.....	۵-۱-نتیجه گیری
۹۴.....	فهرست منابع

فهرست جداول

جدول (۱-۲) سرعت بحرانی آلیاژهای مختلف	۴۲
جدول (۲-۲) چگالی مذاب تعدادی از آلیاژها و اکسیدهای مربوطه	۵۰
جدول (۱-۳) ترکیب شیمیایی آلیاژ A356	۶۶

فهرست تصاویر

شکل (۱-۲) محفظه ای با ارتفاع سیال h و خروج سیال از دهانه‌ی آن ۱۵
شکل (۲-۲) حالات مختلف پدیده‌ی انقباض و نا در اتصالات کانال‌ها ۱۶
شکل (۳-۲) شبکه بندی منظم یک چرخه‌ی سه بازویی ۱۷
شکل (۴-۲) انواع سلول‌های قابل قبول برای نرم افزارها ۱۸
شکل (۵-۲) a: روش اختلاف محدود، b: روش اجزا محدود ۲۰
شکل (۶-۲) نمایی از مکان مذاب ۲۵
شکل (۷-۲) نمونه ساده‌ای از پرکردن قالب که سطح فلز توسط روش VOF مشخص شده است ۲۵
شکل (۸-۲) اجزای یک نرم افزار شبیه سازی ریخته گری ۲۸
شکل (۹-۲) اجزای سیستم راهگاهی ۳۴
شکل (۱۰-۲) پیشرفت ناپایدار جبهه مذاب یک آلیاژ فیلم ساز در هنگام پرکردن قالب ۳۷
شکل (۱۱-۲) آشفتگی و تلاطم سطحی مذاب که باعث تاخوردن فیلم و در نتیجه گیر افتادن هوا در بین آن می‌شود ۳۸
شکل (۱۲-۲) مذاب خروجی از راهباره‌ها با سرعت‌های مختلف ۳۹
شکل (۱۳-۲) پیشرفت جبهه مذاب با سرعت کمتر از حد بحرانی ۴۳
شکل (۱۴-۲) نمودار ساده‌ای برای محدوده نمایش سرعت بحرانی ورود مذاب به قالب برای تولید قطعه مطلوب ۴۴
شکل (۱۵-۲) محدوده تولید قطعه سالم آلومینیوم برنز بر حسب سرعت ورود مذاب به قالب و ضخامت قطعه ۴۴
شکل (۱۶-۲) یک سیستم فشاری ساده ۴۶
شکل (۱۷-۲) یک سیستم غیرفشاری ساده ۴۷
شکل (۱۸-۲) حالات مختلف مذاب سقوط کرده در پای راهگاه بارگیری ۵۶
شکل (۱۹-۲) آشفتگی جریان در حوضچه پای راهگاه کروی ۵۶
شکل (۲۰-۲) انواع تله سرباره و خطوط جریان در آنها ۶۰
شکل (۱-۳) ابعاد قطعه مورد بررسی ۶۳
شکل (۲-۳) نمایی از نرم افزار Solid works ۶۵
شکل (۳-۳) نمایی از درجه با سطح جداش عمودی ۶۹
شکل (۴-۳) استفاده از توری در جلوی صفحه شیشه‌ای ۶۹

شکل (۳-۵) نمایی از ترموکوپل	۷۰
شکل (۶-۳) عملیات بارریزی با استفاده از ملاغه	۷۰
شکل (۱-۴) راهگاه بدون شیب	۷۲
شکل (۲-۴) راهگاه با شیب ۱ درجه	۷۳
شکل (۳-۴) راهگاه با شیب ۲ درجه	۷۳
شکل (۴-۴) راهگاه با شیب ۳ درجه	۷۴
شکل (۵-۴) روند پر شدن قالب در طراحی سیستم راهگاهی بدون حوضچه	۷۵
شکل (۶-۴) حوضچه با شیب ۳ درجه	۷۵
شکل (۷-۴) حوضچه با شیب ۹ درجه	۷۶
شکل (۸-۴) گوه انتهای راهبار با شیب ۴۵ درجه	۷۷
شکل (۹-۴) گوه انتهای راهبار با شیب ۶۰ درجه	۷۷
شکل (۱۰-۴) گوه انتهایی با شیب ۶۵ درجه	۷۸
شکل (۱۱-۴) گوه انتهای راهبار با شیب ۷۰ درجه	۷۸
شکل (۱۲-۴) روند پر شدن قالب بدون وجود پله در راهبار	۷۹
شکل (۱۳-۴) روند پر شدن قالب بدون وجود پله در راهبار	۸۰
شکل (۱۴-۴) ابعاد سیستم راهگاهی کف ریز طراحی شده	۸۰
شکل (۱۵-۴) شبیه سازی جریان مذاب در قالب با ابعاد نشان داده شده در شکل (۱۵-۴)	۸۱
شکل (۱۶-۴) تأثیر کاهش سطح مقطع راهگاه بارریز در روند حرکت مذاب درون قالب	۸۱
شکل (۱۷-۴) تأثیر ارتفاع چاله پای راهگاه (ارتفاع چاله: ۳cm)	۸۲
شکل (۱۸-۴) تأثیر ارتفاع چاله پای راهگاه (ارتفاع چاله: ۲/۲cm)	۸۲
شکل (۱۹-۴) بهترین ابعاد سیستم راهگاهی	۸۳
شکل (۲۰-۴) شبیه سازی سیستم راهگاهی نشان داده شده در شکل (۱۹-۴)	۸۳
شکل (۲۱-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی نمونه‌ی نشان داده شده در شکل (۲۰-۴)	۸۴
شکل (۲۲-۴) نتایج شبیه سازی سیستم راهگاهی با سطح مقطع راهباره $1/5 * 1/5$ سانتی متر	۸۵
شکل (۲۳-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی سیستم راهگاهی با سطح مقطع راهباره $1/5 * 1/5$ سانتی متر	۸۵
شکل (۲۴-۴) نتایج شبیه سازی سیستم راهگاهی با سطح مقطع راهباره $3/5 * 1/5$ سانتی متر	۸۶
شکل (۲۵-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی سیستم راهگاهی با سطح مقطع راهباره $3/5 * 1/5$ سانتی متر	۸۶
شکل (۲۶-۴) نتایج شبیه سازی سیستم راهگاهی با ارتفاع راهگاه بارریز ۹ سانتی متر	۸۷
شکل (۲۷-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی سیستم راهگاهی با ارتفاع راهگاه بارریز ۹ سانتی متر	۸۷

شکل (۲۸-۴) نتایج شبیه سازی سیستم راهگاهی با ارتفاع راهگاه باربریز ۱۴ سانتی متر	۸۸
شکل (۲۹-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی سیستم راهگاهی با ارتفاع راهگاه باربریز ۱۴ سانتی متر	۸۸
شکل (۳۰-۴) مدل طراحی شده با سه راهباره	۸۹
شکل (۳۱-۴) نتایج شبیه سازی سیستم راهگاهی با سه راهباره	۸۹
شکل (۳۲-۴) نتایج عملیات ذوب ریزی سیستم راهگاهی با سه راهباره	۹۰

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

در فرایند تولید قطعات ریخته گری ، متغیرها بسیار زیاد و متنوع اند. این متغیرها که برای طراحی سیستم راهگاهی، تغذیه، مبردها و ... وجود دارد همگی تابع قوانین بقا هستند. لذا از آنجایی که در تهیه ای قطعات ریختگی با جریان مذاب و انتقال حرارت همراه هستیم، مهندسین طراح باید آشنایی کامل با متغیرها و چگونگی اثر آنها روی پدیده های جریان سیال، انتقال حرارت، انجماد و ... داشته باشند. ولی از آنجایی که واقعاً فراوانی متغیرها زیاد می گردد چنین کاری برای مهندسین بسیار دشوار و در بعضی موارد غیر ممکن است. در این راستا شیوه سازی رایانه ای پا به عرصه ای وجود گذاشت و این مسئله را حل نمود. نوآوری ها در توسعه نرم افزارهای شبیه سازی ترکیبی از مفاهیم فیزیکی فرایندهای ریخته گری و هنر برنامه نویسی کامپیوترا بوده به گونه ای که با ارائه ساختاری صحیح و ساده و تأمین دقت های مورد نیاز، امکان تولید قطعات ریخته گری با حداقل هزینه و کیفیت بالا را فراهم آورده است.

امروزه روش های سعی و خطاب برای دستیابی به طرح صحیح و بهینه که در گذشته به صورت عملی انجام می شد به صورت عددی و در کامپیوترا نجام می گیرد. مهمترین امتیاز یک پیشگوئی محاسباتی هزینه پایین آن است. در بیشتر کاربردها، هزینه به کاربردن یک برنامه کامپیوترا به مراتب کمتر از مخارج تحقیق آزمایشگاهی مشابه می باشد به علاوه یک تحقیق محاسبه ای می تواند با سرعت قابل ملاحظه ای انجام شود. از طرف دیگر حل کامپیوترا یک مسئله اطلاعات کامل و جزئیات لازم را به ما خواهد داد و مقادیر تمام متغیر های مر بوthe (مانند سرعت، فشار، درجه حرارت، تمرکز نمونه های شیمیایی، شدت توربولانس) را در سراسر حوزه ای مورد علاقه به دست می دهد.

گاهی اوقات یک متاد پیشگوئی برای مطالعه یک کاربرد پیچیده مهندسی استفاده می شود. برای مطالعه پدیده، شخص توجهش را روی تعداد کمی از پارامتر های اصلی متمرکز کرده و تمام جنبه های دیگر را حذف می کند. بدین ترتیب، شرایط ایده اال زیادی ممکن است به عنوان شرایط

مطلوب مورد ملاحظه قرار گیرد. از طرفی حتی در یک آزمایش عملی دقیق به زحمت می توان به شرایط ایده ال نزدیک شد.

بحث درباره شایستگی های نسبی تحلیل کامپیوترا و تحقیق آزمایشگاهی توصیه ای برای محاسبات کار آزمایشگاهی نیست. شناخت توان ها و ضعف های این دو برای انتخاب صحیح تکنیک مناسب ضروری است. بنابراین حجم مناسب فعالیت برای انجام یک پیشگویی باید ترکیب خردمندانه ای از محاسبات آزمایش باشد. مقدار هر یک از این دو ترکیب مذکور بستگی به طبیعت مسئله و اهداف پیشگویی، مسائل اقتصادی و سایر شرایط خاص وضعیت مورد نظر دارد.

در شیوه سازی سیستم راهگاهی باید توجه داشت که سیستم راهگاهی مجموعه ای از کانال هاست که مذاب را از محفظه ای بارگیری به محفظه قالب هدایت می کند. تولید قطعات ریختگی با کیفیت متالورژیکی و قابلیت اطمینان بالا به هدایت و کنترل صحیح مذاب از حوضچه ای بارگیری تا محفظه ای قالب نیاز دارد.

سیستم راهگاهی برای تولید قطعات ریختگی باید دارای ویژگی های زیر باشد:

- ۱- هدایت جریان مذاب به صورت آرام و یکنواخت، جلوگیری از تلاطم سطحی آن در سیستم راهگاهی و محفظه ای قالب.
- ۲- پر کردن به ترتیب و کامل اجزای سیستم از مذاب.
- ۳- جلوگیری از تشکیل اکسید، آخال، سرباره، گاز، حباب و ورود آنها به محفظه ای قالب .
- ۴- تنظیم شیب دمایی مناسب به منظور ایجاد انجام جهت دار در قطعه ای ریختگی .
- ۵- پر کردن یکنواخت و کامل محفظه ای قالب از مذاب .
- ۶- تولید قطعه ای سالم با توجه به تقاضا
- ۷- اقتصادی بودن وزن سیستم راهگاهی .

علاوه بر این ، سهولت جدا کردن سیستم راهگاهی از قطعه و کاهش عملیات ریخته پیرایی از نکات مهمی است که در طراحی سیستم راهگاهی مورد توجه قرار می گیرد.

در این پژوهش به بررسی متغیرها در طراحی سیستم راهگاهی کف ریز در ریخته گری آلیاژ A356 پرداخته شده است به گونه ای که مذاب محفظه ای قالب را بدون تلاطم پر کند. در این راستا به منظور شبیه سازی سیستم راهگاهی از نرم افزار FLOW3D کمک گرفته شده است.

پژوهش حاضر از پنج فصل مقدمه، مروری بر منابع، روش تحقیق، نتایج و تحلیل آنها و فصل نتیجه گبری تشکیل شده است. در فصل دوم با مروری بر منابع به معرفی قوانین حاکم بر جریان سیال، اجزای سیستم راهگاهی و عوامل مؤثر بر طراحی سیستم راهگاهی پرداخته شده است.

فصل سوم روش تحقیق تشریح گردیده است. در این فصل روش کار با نرم افزار FLOW3D و چگونگی انجام آزمایشات عملی شرح داده شده است.

در فصل چهارم نتایج پژوهش مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. در این فصل عکس های به دست آمده با استفاده از نرم افزار با نتایج آزمایشات عملی مقایسه شده و در فصل پنجم نتایج تحقیق جمع بندی گردیده است.

فصل دوم

مروری بر منابع

۱-۲ - مقدمه ای بر جریان سیال

جریان سیال در گرمایش و تهویه مطبوع ساختمان‌ها نقش اساسی دارند و همچنین در بخش‌های مهمی از صنایع شیمیابی و متالورژی شامل قسمت‌هایی همچون کوره‌ها، مبدل‌های حرارتی، راکتورها و ریخته‌گری قطعات به کار گرفته می‌شوند [۱].

۲-۲ - متد‌های پیشگویی

پیشگویی فرآیندهای انتقال حرارت و جریان سیال به وسیله دو روش اصلی انجام می‌شود: تحقیق آزمایشگاهی و محاسبات تئوری [۱، ۲].

یک پیشگویی تئوری حداکثر استفاده را از نتایج مدل ریاضی خواهد برد و در مقایسه با آن نتایج تجربی را مورد استفاده کمتری قرار می‌دهد. برای فرآیندهای فیزیکی، اصولاً مدل ریاضی عبارت است از یک سری معادلات دیفرانسیل. اگر قرار بود از روش‌های ریاضیات کلاسیک در حل این معادلات استفاده شود، امکان پیشگوئی برای بسیاری از پدیده‌های سودمند وجود نداشت [۱].

با کمی توجه به یک متن کلاسیک عملی می‌توان تعداد مجھولات و معادلات لازم را پیدا کرد. بعلاوه پاسخ اینها اغلب شامل سری‌های نامحدود، توابع خاص، معادلات غیرجبری، مقادیر ویژه و غیره می‌باشد به طوری که ممکن است حل عددی آنها کارساده ای نباشد. خوشبختانه، توسعه متد‌های عددی و در دسترس بودن پردازشگرهای بزرگ این اطمینان را به وجود آورده است که تقریباً برای هر مساله عملی بتوان از مفاهیم یک مدل کامپیوتراستفاده کرد [۲].