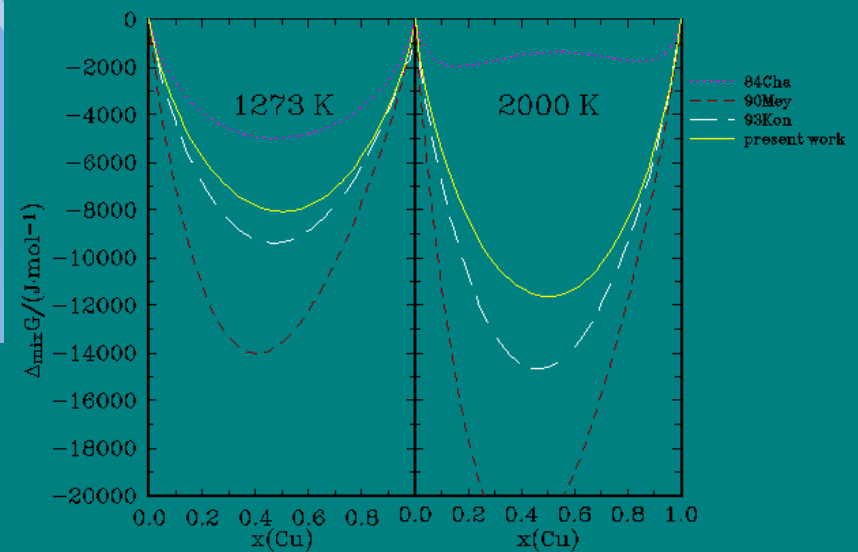


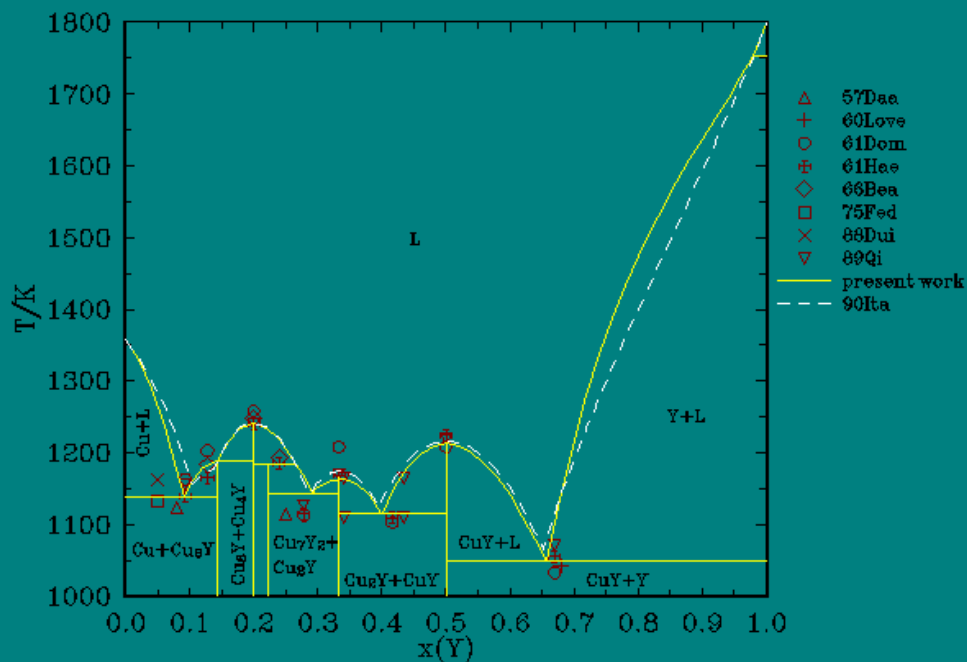
Assessment - sesouhlasení

Assessment

Gibbs energy of liquid alloys of Ba–Cu

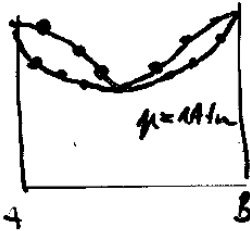


Phase diagram of Cu–Y



Assessment fázového diagramu a fázových dat

FÁZOVÁ DATA



Term. parametry \vec{x}_j^{Mod}
model ů popisující
cích fáze soust.

$$G^C = \sum_j n_j G_j^{\text{Mod.}}(T, n, \vec{x}_j, \vec{x}_j^{\text{Mod}})$$

TERMODYN. DATA

\vec{x}_j^{Mod} ... např. (par.
typu G a C v VMF)

Cíl: nalézt sadu parametrů $\vec{x}_j^{\text{Mod.}}$ dané soustavy takovou,
abychom jejich použitím získávali správný fázový
diagram a správná termodyn. data.

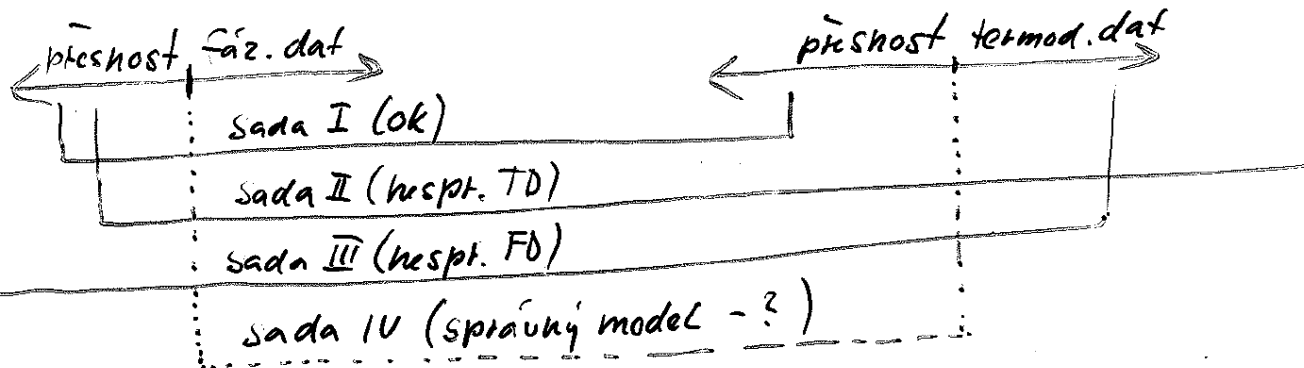
Metodika

Cesta: vyhledání sady TP, takové, aby účelová funkce

např.:
$$\mathcal{F} = \sum_{q=1}^n (Y_q^{\text{Mod}} - Y_q^{\text{exp}})^2 \cdot W_q$$
 ... byla se svým minimum!

$Y_q^{\text{Mod}}, Y_q^{\text{exp}}$... informace získané výpočtem a experimentem

W_q ... váha experimentu (nutný kvalifikovaný přístup)



Pozn.: Sad I může být více \Rightarrow nutné zavedení standardního popisu soustav nižšího řádu (unár: SER, Dinsdale)

"Assess" databáze - "sesouhlasená" databáze term. parametrů fází poskytující správná FD a TD na všech úrovních. (k prakt. využití)

Diskuse

