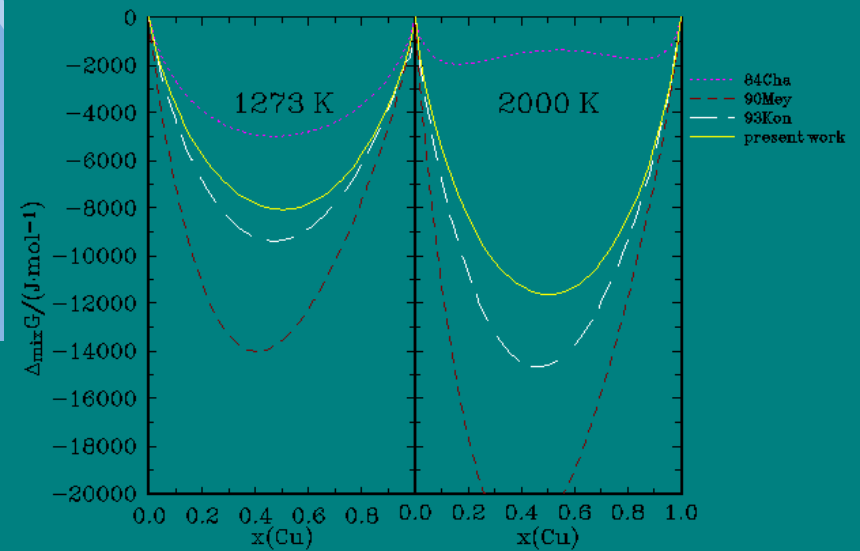


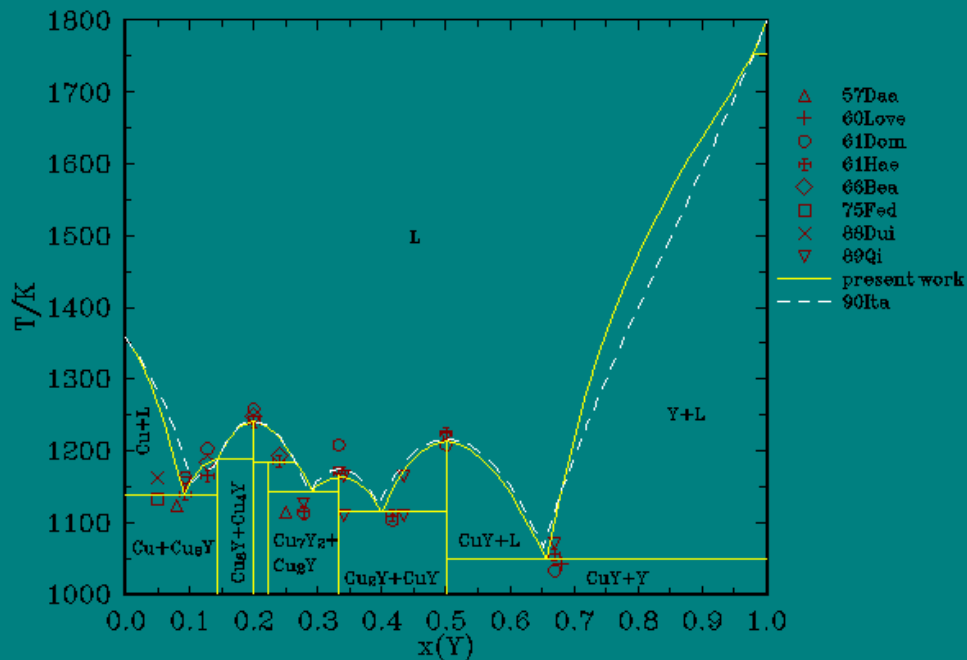
Assessment - sesouhlasení

Assessment

Gibbs energy of liquid alloys of Ba–Cu

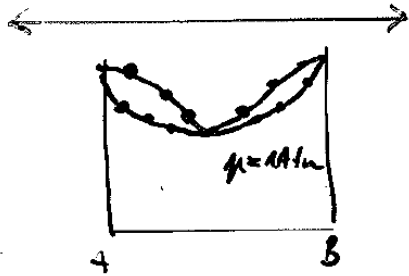


Phase diagram of Cu–Y



Assessment fázového diagramu a fázových dat

FÁZOVÁ DATA



Term. parametry $\overset{\rightarrow \text{Mod}}{\underline{X_j}}$
 model ů popisující-
 cích fáze soust.

TERMODYN. DATA

$\overset{\rightarrow \text{Mod}}{\underline{X^E}}, a_i, f_i, c_{p_i}, \dots$

$$G^C = \sum_j n_j G_j^{\text{Mod.}}(T, n, \overset{\rightarrow \text{Mod.}}{\underline{X_j}}, \overset{\rightarrow \text{Mod.}}{\underline{X}})$$

$\overset{\rightarrow \text{Mod.}}{\underline{X_j}} \dots$ např. (par.
 typu G a C v VMF)

Cíl: nalézt sadu parametrů $\overset{\rightarrow \text{Mod.}}{\underline{X_j}}$ dané soustavy takovou,
 abychom jejich použitím získávali správný fázový
 diagram a správná termodyn. data.

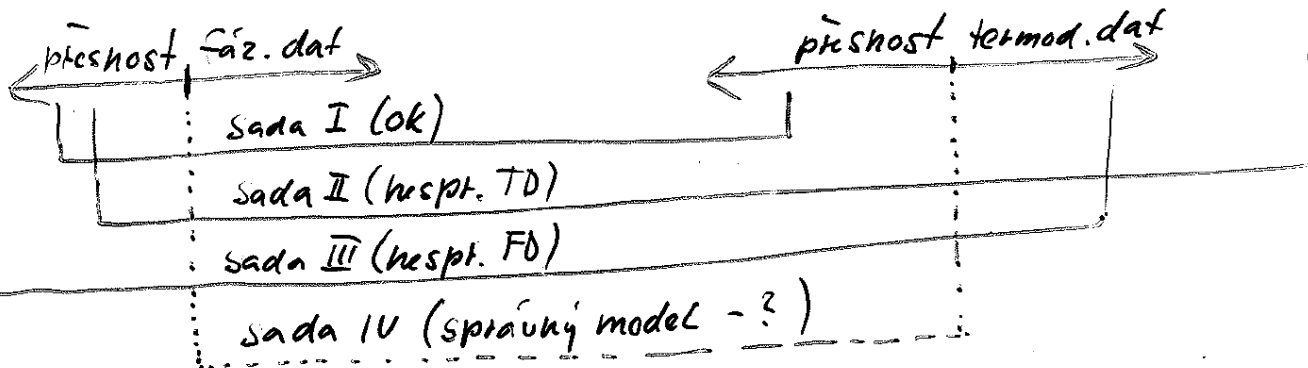
Metodika

Cesta: vyhledání sady TP, takové, aby účelová funkce

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

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

W_q ... váha experimentu (nutný kvalifikovaný přístup)



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

"Assesst" databáze - "sesouhlasená" databáze term. parametry fázi poskytující správná FD a TD na všech úrovních. (k prakt. využití)

Diskuse

