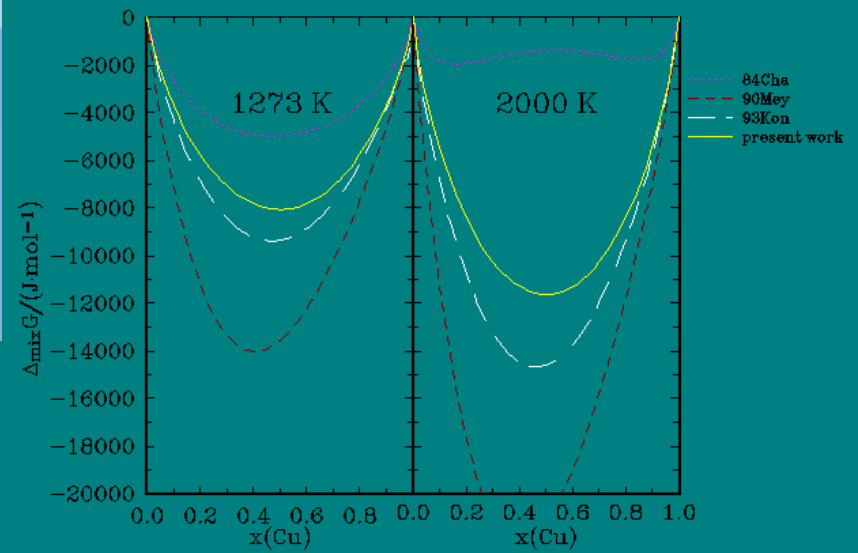


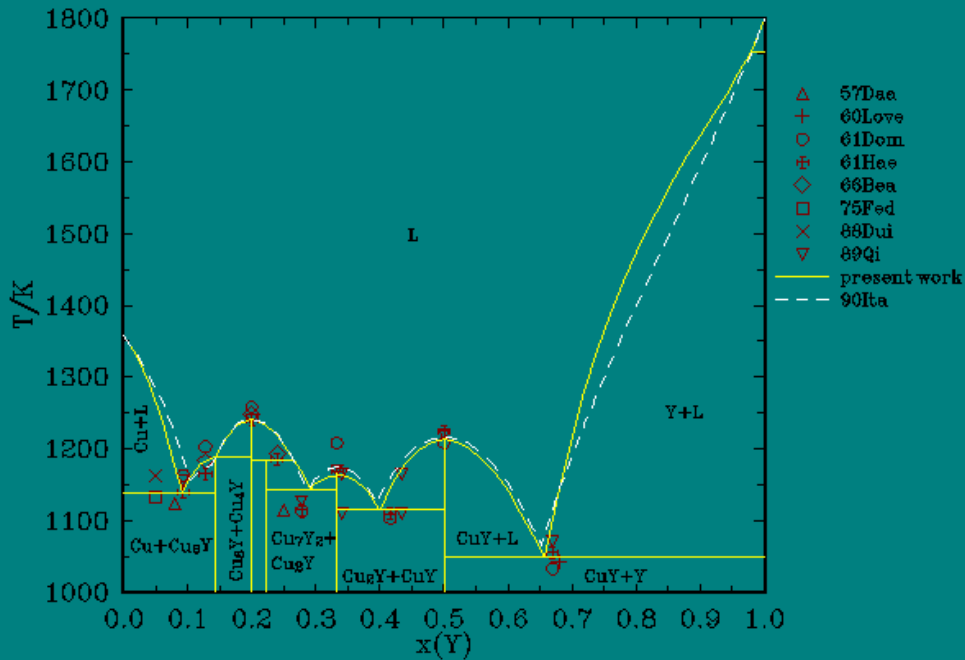
# Assessment - sesouhlasení

## Assessment

Gibbs energy of liquid alloys of Ba-Cu

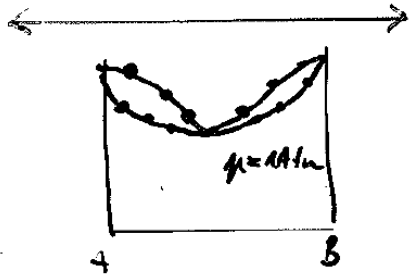


Phase diagram of Cu-Y



# 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

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

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

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

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

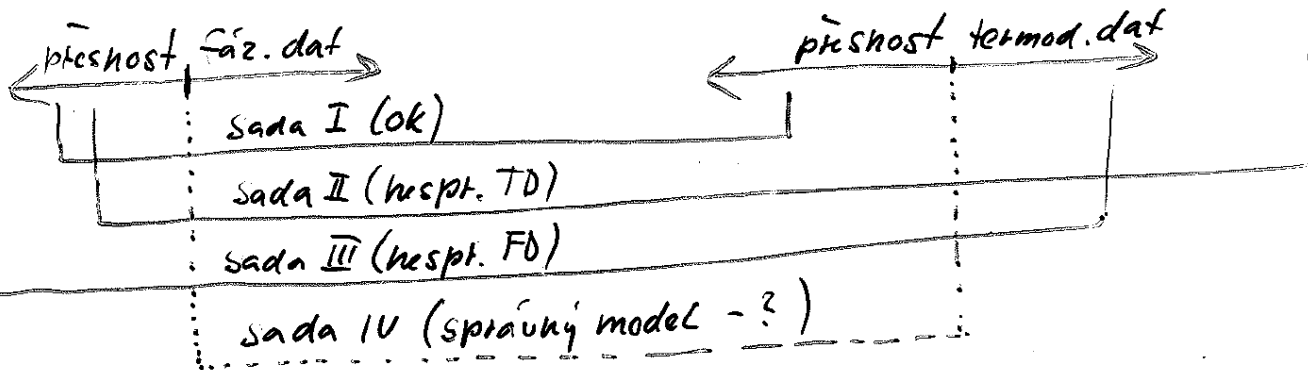
# Metodika

Cesta: vyhledání sady TP, takové, aby účelová funkce

např.: 
$$Q = \sum_{q=1}^n (Y_q^{\text{Mod}} - Y_q^{\text{exp}})^2 \cdot W_q$$
 ... 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 => 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

