

# Introduction à l'optimisation de paramètres thermodynamiques avec PARROT

Nathalie Dupin

Calcul Thermodynamique  
[nathdupin@wanadoo.fr](mailto:nathdupin@wanadoo.fr)

CIRIMAT, Toulouse, 28 mai 2015

# Plan

- ▶ Généralités
- ▶ GES
- ▶ ED\_EXP
- ▶ PARROT

# Généralités

- ▶ L'évaluation thermodynamique d'un système vise à obtenir une description mathématique de l'enthalpie libre de chacune des phases constituant le système considéré.
- ▶ Elle se déroule en plusieurs étapes:
  - une étude bibliographique préalable considérant les résultats expérimentaux et théoriques de cristallographie, diagramme de phase et grandeurs thermodynamiques disponibles dans ce système et éventuellement dans des systèmes similaires ou d'ordre supérieur,
  - la définition de modèles pour les enthalpies libres de chacune des phases,
  - l'optimisation des paramètres thermodynamiques proprement dite.
- ▶ Le but de ce cours est d'introduire les outils disponibles dans le logiciel Thermo-Calc pour faciliter ces tâches.

# Rappel - Modules de base

PROMPT Utilisation / Fichiers (commande)

---

SYS par défaut, module d'entrée dans Thermo-Calc

`.TCM` (MACRO), `.LOG` (SET\_10G)

TDB module de définition du système, d'extraction des données

`.TDB` (SWITCH)

POLY\_3 module de calcul

`.POLY3` (SAVE\_WORKSPACES, READ\_WORKSPACES),  
`.TCM` (MACRO)

POST sous-module de représentation graphique

`.exp` (MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFI,  
APPEND\_EXPERIMENTAL\_DATA,  
QUICK\_EXPERIMENTAL\_PLOT),  
`.pdf`, `.png`, ... (DUMP\_DIGRAM),  
`.ps` (PLOT\_DIGRAM)

Les fichiers en **bleu** sont des fichiers ASCII.

Les **POLY\_3** sont des fichiers binaires utilisables uniquement avec Thermo-Calc.

# Modules utiles pour l'optimisation

Module	Sous-module
--------	-------------

---

SYS

TDB

GES

POLY\_3    POST

PARROT    ED\_EXP

# Modules utiles pour l'optimisation

Module	Sous-module
SYS	
TDB	
GES	
POLY_3	POST
PARROT	ED_EXP
GES	Module de définition du système, d'introduction de la description des phases

# Modules utiles pour l'optimisation

Module	Sous-module
--------	-------------

---

SYS	
-----	--

TDB	
-----	--

GES	
-----	--

POLY_3	POST
--------	------

PARROT	ED_EXP
--------	--------

**GES** Module de définition du système, d'introduction de la description des phases

**ED\_EXP** Module de manipulation des équilibres expérimentaux  
Comme POST dans POLY\_3, ce module est un sous-module.  
On n'y accède pas avec la commande GOTO\_MODULE mais seulement depuis le module PARROT avec la commande EDIT\_EXPERIMENTS.

# Modules utiles pour l'optimisation

Module	Sous-module
SYS	
TDB	
GES	
POLY_3	POST
PARROT	ED_EXP
GES	Module de définition du système, d'introduction de la description des phases
ED_EXP	Module de manipulation des équilibres expérimentaux
PARROT	Module d'optimisation des paramètres thermodynamiques



# Modules utiles pour l'optimisation

Module	Sous-module
SYS	
TDB	
GES	
POLY_3	POST
PARROT	ED_EXP
GES	Module de définition du système, d'introduction de la description des phases
ED_EXP	Module de manipulation des équilibres expérimentaux
PARROT	Module d'optimisation des paramètres thermodynamiques

Avant de pouvoir mener une optimisation dans le module **PARROT**, il faut définir le système et le modèle de chaque phase dans le module **GES** et la valeur des grandeurs à reproduire à l'aide du module **ED\_EXP**.

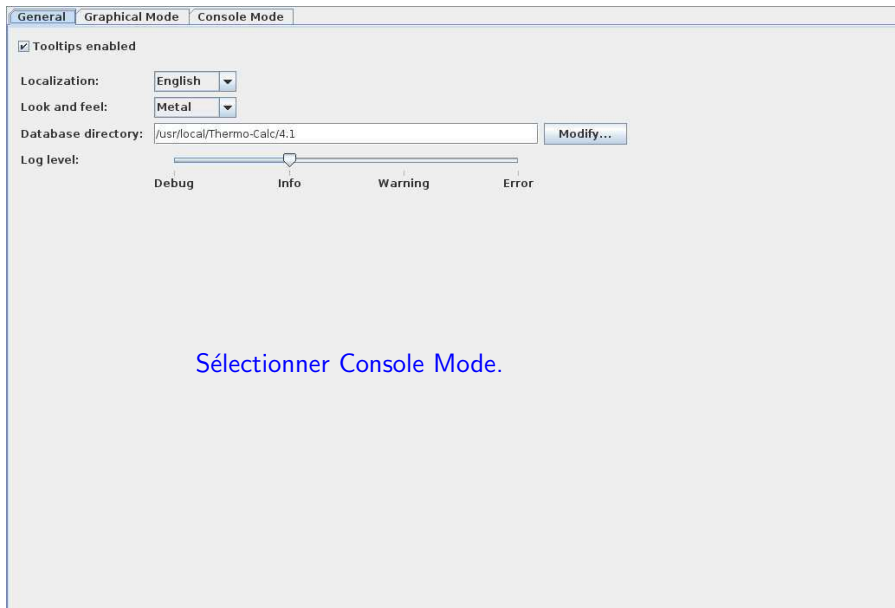
# Modules utiles pour l'optimisation

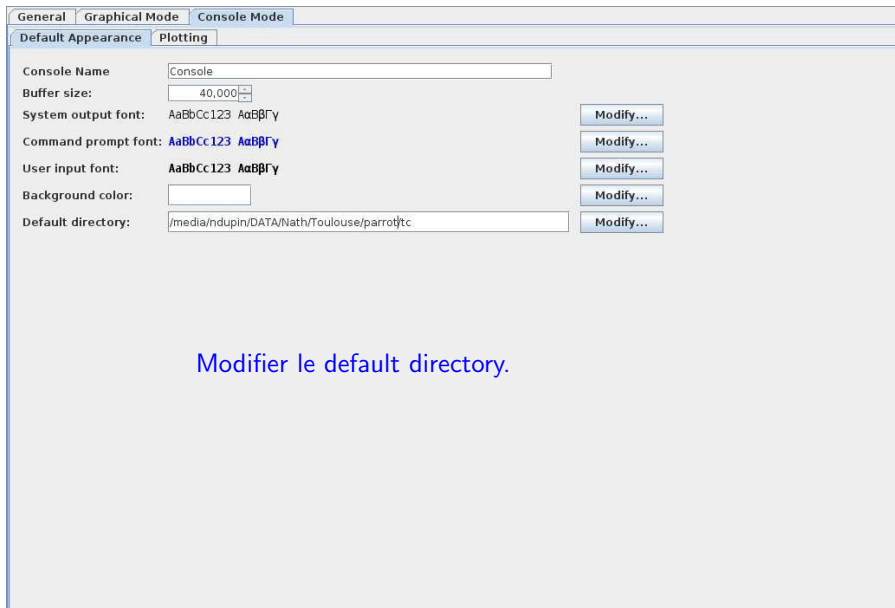
Module	Sous-module
SYS	
TDB	
GES	
POLY_3	POST
PARROT	ED_EXP
GES	Module de définition du système, d'introduction de la description des phases
ED_EXP	Module de manipulation des équilibres expérimentaux
PARROT	Module d'optimisation des paramètres thermodynamiques

Cette présentation est structurée en trois grandes parties correspondant à ces trois modules.

The screenshot shows the Java tool interface. The menu bar includes 'File', 'Tools', 'Window', and 'Help'. The 'Tools' menu is open, showing 'Options' and 'Database Checker'. The console window displays 'Thermo-Calc' and 'SYS:'. A plot window titled 'Plot 1' is visible on the right, showing a y-axis ranging from 0.35 to 1.00.

Sélectionner Tools/Options.



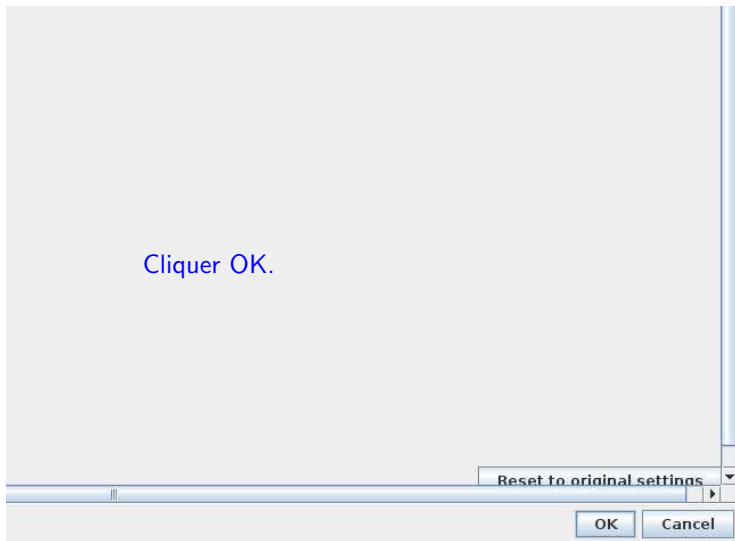


The screenshot shows the 'Console Mode' configuration window. The 'Default Appearance' tab is selected, and the 'Plotting' sub-tab is active. The following settings are visible:

- Console Name: Console
- Buffer size: 40,000
- System output font: AaBbCc123 AaBbΓγ
- Command prompt font: AaBbCc123 AaBbΓγ
- User input font: AaBbCc123 AaBbΓγ
- Background color: (empty)
- Default directory: /media/ndupin/DATA/Nath/Toulouse/parrot/etc

Each font and background color setting has a corresponding 'Modify...' button to its right.

**Modifier le default directory.**



File Tools Window Help



New



Open



Save



Switch to Graphical Mode

Console

Console 1



Thermo-Calc

`SYS:exit`

Pour obtenir une nouvelle console  
prenant en compte les modifications.

Console Results

Results Console 1

Plot 1



1.00

0.95

0.90

0.85

0.80

0.75

0.70

0.65

0.60

0.55

0.50

0.45

0.40

0.35

# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	EXIT	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	GOTO_MODULE	REINITIATE
BACK	HELP	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	INFORMATION	SET_INTERACTIVE
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	



# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	<b>EXIT</b>	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	<b>GOTO_MODULE</b>	REINITIATE
<b>BACK</b>	<b>HELP</b>	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	<b>INFORMATION</b>	<b>SET_INTERACTIVE</b>
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	

Commandes communes à plusieurs autres modules de Thermo-Calc

# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	EXIT	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	GOTO_MODULE	REINITIATE
BACK	HELP	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	INFORMATION	SET_INTERACTIVE
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	

Commandes importantes propres à GES.

# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
...
GO G
?
ENTER_ELEMENT
FE
LIST_DATA
```

# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
...
GO G
?
ENTER_ELEMENT
FE
LIST_DATA
```

```
GES:LIST_DATA
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:
OPTIONS?:

IOUTPUT FROM GIBBS ENERGY SYSTEM ON UNIX / KTH          DATE 2015- 5-18
FROM DATABASE:

ALL DATA IN SI UNITS
FUNCTIONS VALID FOR  298.15<T< 6000.00 K UNLESS OTHER LIMITS STATED

ELEMENT STABLE ELEMENT REFERENCE  MASS          H298-H0      S298
  1 FE  BCC_A2                      5.5847E+01  4.4890E+03  2.7280E+01

SPECIES                                STOICHIOMETRY
  1 FE                                FE

SYMBOL      STATUS  VALUE/FUNCTION
  1 R        80000000  8.3145100E+00
  2 RTLNP    20000000  +R*T*LN(1E-05*P)
```

Lorsque la commande **ENTER\_ELEMENT** définit un élément dont le nom correspond à un symbole chimique existant, son état de référence, sa masse molaire, H298-H0 et S298 sont définis par défaut.

# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
```

```
...
```

```
GO G
```

```
?
```

```
ENTER_ELEMENT
```

```
FE
```

```
LIST_DATA
```

```
AMEND_ELEMENT FE
```

```
?
```

```
2
```

# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
```

```
...
```

```
GO G
```

```
?
```

```
ENTER_ELEMENT
```

```
FE
```

```
LIST_DATA
```

```
AMEND_ELEMENT FE
```

```
GES:AMEND_ELEMENT
```

```
... the command in full is AMEND_ELEMENT_DATA
```

```
ELEMENT NAME:FE
```

```
NEW STABLE ELEMENT REFERENCE /BCC_A2/:
```

```
NEW ATOMIC MASS /55.847/:
```

```
NEW H(298.15)-H(0) /4489/:
```

```
NEW S(298.15) /27.28/:
```

```
Default element reference state symbol index /1/?
```

You are expected to give an integer defining the symbol indicating the reference state type for an element when entering and listing data. Legal values are:

```
1, symbol: G
```

```
2, symbol: H298
```

```
3, symbol: H0
```

```
Default element reference state symbol index /1/:
```

```
?
```

```
2
```

La commande **AMEND\_ELEMENT\_DATA** peut permettre de modifier la phase de référence, la masse molaire, H298-H0 et S298, en particulier pour des éléments ou des isotopes qui ne seraient pas définis par défaut mais surtout la fonction de référence.

Par défaut, il s'agit de l'enthalpie libre de la phase de référence à la température considérée. C'est une référence qui n'est plus très utilisée parce qu'elle ne permet pas de décrire les Cp.

La référence la plus couramment utilisée (2), correspondant à celle utilisée par la base unaire du SGTE, est l'enthalpie de la phase de référence à 298.15K (H298).

Il est également possible de modifier cette référence pour tous les éléments avec la commande **REINITIATE**.

# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
```

```
...
```

```
GO G
```

```
?
```

```
ENTER_ELEMENT
```

```
FE
```

```
LIST_DATA
```

```
AMEND_ELEMENT FE
```

```
?
```

```
2
```

```
ENTER_PHASE
```

```
LIQUID
```

```
?
```

# Définition du système (GES)

```

SET_LOG setup
...
GO G
?
ENTER_ELEMENT
FE
LIST_DATA

AMEND_ELEMENT FE

?
2

ENTER_PHASE
LIQUID
?

```

## GES:ENTER\_PHASE

NAME OF PHASE:LIQUID

TYPE CODE:?

TYPE CODE

The phase-type code must be specified for the phase if it is not an ordinary solution phases. One can press <RETURN> if the phase is ordinary.

The following phase-type codes can be defined:

- \* G for a gaseous mixture phase.
- \* A for an aqueous solution phase.
- \* L for a liquid solution phase [but not A (aqueous) or Y (ionic liquid)].
- \* Y for an ionic liquid solution phase (that is specially treated by the Ionic Two-Sublattice Liquid Model).
- \* I for a phase with charged species [but not G (gaseous), A (aqueous) or Y (ionic liquid)].
- \* F for an ordered FCC or HCP solution phase with 4 substitutional sublattices (additionally, such a phase can also have an interstitial sublattice).
- \* B for an ordered BCC solution phase with 4 with 4 substitutional sublattices (additionally, such a phase can also have an interstitial sublattice).

Note that a G phase (gaseous mixture) or an A phase (aqueous solution) is usually treated as a substitutional phase without sublattice, and that an L phase (ordinary liquid solution) is normally (but not always) modeled as a substitutional phase without sublattice, too.

Pour la plupart des phases, la commande **ENTER\_PHASE** ne requière pas de code spécifique. Pour cette phase liquide, utilisons le code L comme l'indique l'aide en ligne.



# Définition du système (GES)

```
SET_LOG setup
```

```
...
```

```
GO G
```

```
?
```

```
ENTER_ELEMENT
```

```
FE
```

```
LIST_DATA
```

```
LIST_PHASE
```

```
LIQUID
```

```
AMEND_ELEMENT FE
```

```
?
```

```
2
```

```
ENTER_PHASE
```

```
LIQUID
```

```
?
```

```
L
```

```
FE
```

# Définition du système (GES)

```

SET_LOG setup
...
GO G
?
ENTER_ELEMENT
FE
LIST_DATA

AMEND_ELEMENT FE

?
2

ENTER_PHASE
LIQUID
?
L

FE

```

```

LIST_PHASE
LIQUID

```

```

TYPE CODE:L
NUMBER OF SUBLATTICES /1/:
NAME OF CONSTITUENT:FE
NAME OF CONSTITUENT:
WILL YOU ADD CONSTITUENTS LATER /NO/:
DO YOU WANT A LIST OF POSSIBLE PARAMETERS /NO/:
GES:LIST_PHASE
... the command in full is LIST_PHASE_DATA
Phase name:LIQUID

LIQUID
CONSTITUENTS: FE

G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC_A2,FE;0) = 0.0

```

# Définition du système (GES)

```

SET_LOG setup          LIST_PHASE
...                   LIQUID
GO G
?
ENTER_ELEMENT         ENTER_PARAMETER
FE                    G(LIQUID,FE;0)
LIST_DATA             13265.87+117.57557*T-23.5143*T*LN(T)-0.00439752*T**2-5.89269E-8*T**3+
                       1811
                       Y
AMEND_ELEMENT FE     -10838.83+291.302*T-46.0*T*LN(T)

                       LIST_PARAMETER G(LIQUID,FE;0)
?
2

ENTER_PHASE
LIQUID
?
L

FE

```

# Définition du système (GES)

```

SET_LOG setup          LIST_PHASE
...                   LIQUID
GO G
?
ENTER_ELEMENT         ENTER_PARAMETER
FE                    G(LIQUID,FE;0)
LI

```

```

GES:ENTER_PARAMETER
PARAMETER:G(LIQUID,FE;0)
  G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC_A2,FE;0)
LOW TEMPERATURE LIMIT /298.15/:
AM FUNCTION:13265.87+117.57557*T-23.5143*T*LN(T)-0.00439752*T**2-5.89269E-8*T**3+77358.5*T**(-1)
  &
HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/:1811
ANY MORE RANGES /N/:Y
FUNCTION:-10838.83+291.302*T-46.0*T*LN(T)
? &
2 HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/:
ANY MORE RANGES /N/:
GES:LIST_PARAMETER G(LIQUID,FE;0)
EN   G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC_A2,FE;0) =
LI   298.15<T< 1811.00: +13265.87+117.57557*T-23.5143*T*LN(T)-.00439752*T**2
?   -5.89269E-08*T**3+77358.5*T**(-1)
L   1811.00<T< 6000.00: -10838.83+291.302*T-46*T*LN(T)
FE

```

# Définition du système (GES)

```

SET_LOG setup          LIST_PHASE
...                   LIQUID
GO G
?
ENTER_ELEMENT         ENTER_PARAMETER
FE                    G(LIQUID,FE;0)
LI

```

```

AM  GES:ENTER_PARAMETER
    PARAMETER:G(LIQUID,FE;0)
    G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC_A2,FE;0)
    LOW TEMPERATURE LIMIT /298.15/:
    FUNCTION:13265.87+117.57557*T-23.5143*T*LN(T)-0.00439752*T**2-5.89269E-8*T**3+77358.5*T**(-1)
    &
    HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/:1811
    ANY MORE RANGES /N/:Y
    FUNCTION:-10838.83+291.302*T-46.0*T*LN(T)
    ?
    2  &
    HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/:
    ANY MORE RANGES /N/:
    EN  GES:LIST_PARAMETER G(LIQUID,FE;0)
    LI  G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC_A2,FE;0) =
    ?   298.15<T< 1811.00: +13265.87+117.57557*T-23.5143*T*LN(T)-.00439752*T**2
    L   -5.89269E-08*T**3+77358.5*T**(-1)
    FE  1811.00<T< 6000.00: -10838.83+291.302*T-46*T*LN(T)

```

Tous ces chiffres!!!

D'où viennent-ils?

Il faut vraiment taper tout ça?

# Définition du système (GES)

CALPHAD Vol. 15, No. 4, pp. 317-425, 1991

0364-5916/91 \$3.00 +.00

Printed in the USA.

1991 Pergamon Press plc

SE  
..  
GO  
?  
EN  
FE  
LI

## SGTE DATA FOR PURE ELEMENTS

A T Dinsdale

Division of Materials Metrology, National Physical Laboratory,  
Teddington, Middlesex, TW11 0LW, UK

AM

?  
2

### ABSTRACT

Thermodynamic data for the condensed phases of 78 elements as currently used by SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) are tabulated. SGTE is a consortium of seven organisations in Western Europe engaged in the compilation of a comprehensive, self consistent and authoritative thermochemical database for inorganic and metallurgical systems. The data are being published here in the hope that they will become widely adopted within the international community as a sound basis for the critical assessment of thermodynamic data, thereby, perhaps, limiting unnecessary duplication of effort.

EN  
LI  
?  
L  
FE

# Définition du système (GES)

```

Data for Fe in the form of G-HSER
SET_LOG setup
...
GO G
?
ENTER_ELEMENT
FE
LIST_DATA
BCC_A2
Tc = 1043          B0 = 2.22
A = 7.042095E-6    a0 = 2.3987E-5      a1 = 2.569E-8
K0 = 5.965E-12    K1 = 6.5152E-17     n = 4.7041
1225.7 + 124.134 T - 23.5143 T ln(T) - 0.00439752 T2 - 5.89269E-8 T3 + 77358.5 T1 + Gmag + Gpres
(298.15 < T < 1811.00)
-25383.581 + 299.31255 T - 46.0 T ln(T) + 2.2960305E31 T9 + Gmag + Gpres (1811.00 < T < 6000.00) 3+

FCC_A1
AMEND_ELEMENT
?
2
ENTER_PHASE
LIQUID
?
L
FE
TN = 67          B0 = 0.7
A = 6.688726E-6    a0 = 7.3097E-5
K0 = 6.2951E-12    K1 = 6.5152E-17     n = 5.1665
-236.7 + 132.416 T - 24.6643 T ln(T) - 0.00375752 T2 - 5.89269E-8 T3 + 77358.5 T1 + Gmag + Gpres
(298.15 < T < 1811.00)
-27097.396 + 300.25256 T - 46.0 T ln(T) + 2.78854E31 T9 + Gmag + Gpres (1811.00 < T < 6000.00)

HCP_A3
A = 6.59121E-6      a0 = 7.3646E-5
K0 = 6.2951E-12    K1 = 6.5152E-17     n = 5.1665
-2480.08 + 136.725 T - 24.6643 T ln(T) - 0.00375752 T2 - 5.89269E-8 T3 + 77358.5 T1 + Gpres (298.15 < T < 1811.00)
-29340.78 + 304.56206 T - 46.0 T ln(T) + 2.78854E31 T9 + Gpres (1811.00 < T < 6000.00)

LIQUID
A = 6.62574E-6      a0 = 10.7895E-5      a3 = -25.79493
K0 = 0.75475E-12   K1 = 485.09E-17     n = 6.59834
13265.87 + 117.57557 T - 23.5143 T ln(T) - 0.00439752 T2 - 5.89269E-8 T3 + 77358.5 T1 - 3.6751551E-21 T9 + Gpres
(298.15 < T < 1811.00)
10838.83 + 291.302 T - 46.0 T ln(T) + Gpres (1811.00 < T < 6000.00)

```

# Définition du système (GES)

SET\_LOG setup

...

GO G

?

ENTER\_ELEMENT

FE

LIST\_DATA

AMEND\_ELEMENT FE

?

2

ENTER\_PHASE

LIQUID

?

L

FE

The screenshot shows the SGTE website interface. At the top, there is a browser window with the URL `www.crct.polymtl.ca/sgte/index.php`. The website header includes the SGTE logo and the text "Scientific Group ThermoData Europe". A navigation menu on the left lists: Home, About us, Methodology, Products, Intranet, Free, Links, and Contact. The main content area features a central banner with the text: "SGTE is a consortium of centers engaged in the development of thermodynamic databases for inorganic and metallurgical systems and their application to practical problems". Below this text are several scientific images: "Corrosion", "Brewing", "Phase Diagrams", "Pollution Control", "Pyrometallurgy", "Microelectronics", and "Chemical Vapor Deposition". A "47965 visitors" badge is visible on the left. At the bottom, a welcome message reads: "Welcome to the website of SGTE. If you are interested in thermodynamics or phase diagrams for inorganic or metallurgical materials I hope that we will have something which will interest you. Our members collectively have unrivalled expertise in critically assessing thermodynamic data and applying them to a wide variety of industrial and environmental concerns. If you see something on our website of interest and would like to find out more, ... or alternatively if you are concerned with a new area and you think we may be able to help you, please contact one of our members or enter your question by clicking on the 'Contact' link in the menu. We will be only too pleased to learn more about your interests. Torsten Markus, SGTE Chairman". The footer indicates "Last update: 12 May 2015 07h47".

\*T\*\*2-5.89269E-8\*T\*\*3+



# Définition du système (GES)

SET\_LOG setup

...

GO G

?

ENTER\_ELEMENT

FE

LIST\_DATA

AMEND\_ELEMENT FE

?

2

ENTER\_PHASE

LIQUID

?

L

FE

The screenshot shows a web browser window with the URL `www.crct.polymtl.ca/sgte/index.php?free=1`. The page title is "SGTE - Scientific Gro...". The browser's search bar contains the word "Rechercher". The website header features the "SGTE" logo and the text "Scientific Group ThermoData Europe". A navigation menu on the left includes links for Home, About us, Methodology, Products, and Intranet. The main content area is titled "Free" and contains the following text:

The **SGTE** Unary Database contains data for around 78 elements in a form appropriate for phase diagram modelling. Assessed data are provided for stable and metastable phases for each element from 298.15 K, or in some cases 200 K. In some cases, additional terms are included to describe the pressure or magnetic contributions to the Gibbs energy. The data have been published in a paper by Alan Dinsdale (NPL).

\*SGTE Data for Pure Elements\*, Dinsdale AT, CALPHAD, 15(4), 1991, pp. 317-425.

Thermodynamic properties derived from these data are tabulated in "Binary Alloy Phase Diagrams" (ASM International) and in "CRC Handbook of Chemistry and Physics".

"Binary Alloy Phase Diagrams" (2nd Edition), Ed. T B Massalski, (ASM International), pp T13-T15.  
 "CRC Handbook of Chemistry and Physics" (74th Edition), Ed. D R Lide, (CRC Press).

The latest version of the UNARY database is version 5.0.

Click **HERE** to download.

At the bottom of the page, it says "Last update : 12 May 2015 07h47". The footer of the browser window shows the URL `www.crct.polymtl.ca/sgte/unary50.tdb`.

\*T\*\*2-5.89269E-8\*T\*\*3+

# Définition du système (GES)

SET\_LOG setup

...

GO G

?

ENTER\_ELEMENT

FE

LIST\_DATA

AMEND\_ELEMENT FE

?

2

ENTER\_PHASE

LIQUID

?

L

FE

```

$ Version 5.0 of Unary database - 2 June 2009
$TITLE=SGTE Unary Database version v5.0 - 2 June 2009
$ General changes since version 3.0:
$ Revised data for Ag CUB_A13
$ New data for BCT_A5, HCP_ZN
$ New data for Al HCP_ZN
$ New data for As RED_P
$ New data for Au DHCP
$ Revised data for B GRAPHITE
$ Data removed for BCC_A2, FCC_A1, HCP_A3
$ New data for ALPHA_RHOMBO_B
$ New data for BI_BIIN_EPSILON, DIAMOND_A4
$ Revised data for Ca FCC_A1, BCC_A2, HCP_A3
$ New data for Cd RHOMBO_A10, BCT_A5, BCC_A2
$ New data for Ce HCP_A3, DHCP
$ Revised data for Co FCC_A1
$ New data for Cr HCP_ZN
$ New data for Cu HCP_ZN
$ Revised data for HCP_A3
$ New data for Er BCC_A2
$ Revised data for Eu BCC_A2
$ New data for Fe ORTHORHOMBIC_A20, TETRAGONAL_U
$ Revised data for FCC_A1, HCP_A3
$ New data for Ga HCP_ZN, DIAMOND_A4
$ New data for Gd FCC_A1
$ Revised data for BCC_A2
$ New data for Ge RHOMBOHEDRAL_A7, BCT_A5
$ Revised data for Hf HCP_A3, BCC_A2, FCC_A1
$ New data for Hg TETRAGONAL_A6, HCP_A3, RHOMBO_A10
$ Revised data for Ho BCC_A2, LIQUID, HCP_A3
$ New data for In BCT_A5, RHOMBOHEDRAL_A7, BIIN_EPSILON, HCP_ZN, DHCP
$ Revised data for FCC_A1, TET_ALPHA1
$ New data for Mg HCP_ZN
$ Revised data for Mn CBCC_A12, CUB_A13, FCC_A1, BCC_A2, LIQUID, HCP_A3
$ Remove LAVES_C14
$ Revised data for Ni FCC_A1, LIQUID, BCC_A2, HCP_A3, CBCC_A12, CUB_A13
$ New data for BCT_A5
$ New data for Nb HCP_A3
$ Revised data for Os BCC_A2
$ New data for P RHOMBOHEDRAL_A7

```

\*\*\*2-5.89269E-8\*T\*\*\*3+

# Définition du système (GES)

SET\_LOG setup

...

GO G

?

ENTER\_ELEMENT

FE

LIST\_DATA

AMEND\_ELEMENT FE

?

2

ENTER\_PHASE

LIQUID

?

L

FE

```

http://www...ary50.tdb
www.crct.polymtl.ca/sgte/lunary50.tdb
Rechercher
Les plus visités Getting Started
-646908*T**(-1); 1095.00 Y
-6890.641+175.517247*T-38.11624*T*LN(T); 1901 N !
$ Fe
$ -----
FUNCTION GHSEFE 298.15
1225.7+124.134*T-23.5143*T*LN(T)-4.39752E-3*T**2-0.058927E-6*T**3
+77359*T**(-1); 1811 Y
-25383.581+299.31255*T-46*T*LN(T)+2296.03E28*T**(-9); 6000.00 N !
FUNCTION GFCCFE 298.15
-236.7+132.416*T-24.6643*T*LN(T)-3.75752E-3*T**2-0.058927E-6*T**3
+77359*T**(-1); 1811 Y
-27097.3963+300.252559*T-46*T*LN(T)+2788.54E28*T**(-9); 6000.00 N !
FUNCTION GLIOFE 298.15 12040.17-6.55843*T-367.516E-23*T**7+GHSEFE; 1811 Y
-10838.83+291.302*T-46*T*LN(T); 6000.00 N !
FUNCTION GHCPFE 298.15
-2480.08+136.725*T-24.6643*T*LN(T)-3.75752E-3*T**2-0.058927E-6*T**3
+77359*T**(-1); 1811.00 Y
-29340.776+304.561559*T-46*T*LN(T)+2788.54E28*T**(-9); 6000.00 N !
$ Ga
$ -----
FUNCTION GHSEGA 200.00
-21312.331+585.263691*T-108.2287832*T*LN(T)+227.155636E-3*T**2
-118.575257E-6*T**3+439954*T**(-1); 302.91 Y
-7055.643+132.73019*T-26.0692906*T*LN(T)+0.1506E-3*T**2-0.040173E-6*T**3
-118332*T**(-1)+164.547E21*T**(-9); 4000.00 N !
FUNCTION GLIQGA 200 5491.298-18.073995*T-70.171E-18*T**7+GHSEGA; 302.91 Y
-1389.188+114.049043*T-26.0692906*T*LN(T)+0.1506E-3*T**2-0.040173E-6*T**3
-118332*T**(-1); 4000 N !
FUNCTION GHCPGA 200 4500-9.5*T+GHSEGA; 4000 N !
FUNCTION GFCCGA 200 3800-10.2*T+GHSEGA; 4000 N !
FUNCTION GBCCGA 200 4500-11.7*T+GHSEGA; 4000 N !
$ Gd
$ -----

```

\*\*2-5.89269E-8\*T\*\*3+

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
...
GO DA
SWITCH
PURE
```

On souhaite en général utiliser les descriptions des éléments purs déjà disponibles. Cela permet de combiner la description finalement obtenue avec celles d'autres systèmes préalablement déterminées.

La description des éléments purs est disponible dans des publications, sur internet via le site SGTE mais bien sûr aussi via Thermo-Calc.

Un passage par le module TDB et l'extraction des données de la base PURE évite une frappe fastidieuse et d'éventuelles fautes de frappe.

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

**GES:LIST\_PHASE LIQUID**

... the command in full is LIST\_PHASE\_DATA

LIQUID

CONSTITUENTS: FE,TI

G(LIQUID,FE;0)-H298(BCC\_A2,FE;0) = +GLIQFE

G(LIQUID,TI;0)-H298(HCP\_A3,TI;0) = 298.15<T< 4000.00: +GLIQTI

La description des éléments purs de la base PURE utilise des fonctions.

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

```
LIST_SYMBOL GLIQFE
```

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

```
LIST_SYMBOL GLIQFE
```

```
GES:LIST_SYMBOL GLIQFE
```

```
... the command in full is LIST_SYMBOLS
```

```
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:
```

```
SYMBOL      STATUS  VALUE/FUNCTION
```

```
  3 GLIQFE   20000000
```

```
    298.15<T< 1811.00: +GHSEFE+12040.17-6.55843*T-3.67516E-21*T**7
```

```
    1811.00<T< 6000.00: -10838.83+291.302*T-46*T*LN(T)
```

Cette fonction est définie sur deux intervalles de température.  
La fonction sur le premier intervalle utilise une autre fonction.



# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

```
LIST_SYMBOL GLIQFE
```

**Attention.** Les fonction de GES sont fondamentalement différentes de celles qui peuvent être définies dans les modules POLY\_3 ou POST. Elles ne peuvent pas être atteintes explicitement en dehors des modules GES et PARROT.

```
GES:LIST_SYMBOL GLIQFE
```

```
... the command in full is LIST_SYMBOLS
```

```
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:
```

```
SYMBOL      STATUS      VALUE/FUNCTION
```

```
  3 GLIQFE      20000000
```

```
    298.15<T< 1811.00: +GHSEFE+12040.17-6.55843*T-3.67516E-21*T**7
```

```
    1811.00<T< 6000.00: -10838.83+291.302*T-46*T*LN(T)
```

Cette fonction est définie sur deux intervalles de température.  
La fonction sur le premier intervalle utilise une autre fonction.

# Définition du système (TDB)

```
SET_LOG setup_tdb
```

```
...
```

```
GO DA
```

```
SWITCH
```

```
PURE
```

```
DEF_SYS FE TI
```

```
LIST_SYS
```

```
REJECT PHASE *
```

```
RESTORE PHASE
```

```
LIQUID FCC_A1 BCC_A2 HCP_A3
```

```
GET
```

```
GO G
```

```
LIST_PHASE LIQUID
```

```
LIST_SYMBOL GLIQFE
```

Que la description des éléments purs ait été introduite via GES ou TDB, la définition du système se poursuit par l'introduction des phases manquantes.

# Définition des phases manquantes

```
ENTER_PHASE C14_LAVES
```

```
2
```

```
2
```

```
1
```

```
FE
```

```
TI
```

```
FE,TI
```

```
LIST_PHASE C14
```

# Définition des phases manquantes

```
ENTER_PHASE C14_LAVES
```

```
2
```

```
2
```

```
1
```

```
FE
```

```
TI
```

```
FE,TI
```

Nous avons défini une phase nommée C14\_LAVES modélisée avec deux sous-réseaux, le premier avec 2 sites, le deuxième avec un seul site. Les deux éléments sont admis sur ces deux sous-réseaux. Le modèle pour cette phase peut donc être schématisé  $(\text{Fe,Ti})_2(\text{Fe,Ti})_1$ .

```
LIST_PHASE C14
```

# Définition des phases manquantes

```
ENTER_PHASE C14_LAVES
```

```
2
```

```
2
```

```
1
```

```
FE
```

```
TI
```

```
FE,TI
```

```
LIST_PHASE C14
```

```
AMEND_PHASE C14
```

```
?
```

```
MAJ
```

```
FE
```

```
TI
```

Lorsque l'on travaille avec PARROT, la global minimisation n'est pas activée. Il est intéressant de définir les constitutions les plus probables par défaut pour faciliter le calcul des états d'équilibres stables. Ainsi, pour la phase que nous venons de définir, elle aura majoritairement Fe sur le premier sous-réseau, Ti sur le deuxième. Afin d'indiquer ce défaut, la commande **AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION** est utilisée.

Ce défaut sera utilisé lors de l'utilisation des commandes de POLY\_3 :  
**SET\_START\_CONSTITUTION** phase\_name \* ou  
**SET\_ALL\_START\_VAMUES** avec l'option F.

# Définition des phases manquantes

ENTER\_PHASE C14\_LAVES

2

2

1

FE

TI

FE,TI

LIST\_PHASE C14

AMEND\_PHASE C14

?

MAJ

FE

TI

De nombreuses options existent pour la commande `AMEND_PHASE_DESCRIPTION`. Celles à retenir en premier lieu apparaissent en rouge ci-dessous.

EXCESS\_MODEL

**MAGNETIC\_ORDERING**

DEBYE\_HUCKEL

STATUS\_BITS

NEW\_CONSTITUENT

RENAME\_PHASE

**COMPOSITION\_SETS**

GLASS\_TRANSITION

DISORDERED\_PART

**MAJOR\_CONSTITUENT**

ZRO2\_TRANSITION

REMOVE\_ADDITIONS

QUASICHEM\_IONIC

QUASICHEM\_FACTOO

QUASICHEM\_IRSID

TERNARY\_EXTRAPOLAT

HKF\_ELECTROSTATIC

DEFAULT\_STABLE

SITE\_RATIOS

FRACTION\_LIMITS

# Définition des phases manquantes

ENTER\_PHASE C14\_LAVES

2

2

1

FE

TI

FE,TI

LIST\_PHASE C14

AMEND\_PHASE C14

?

MAJ

FE

TI

De nombreuses options existent pour la commande `AMEND_PHASE_DESCRIPTION`. Celles à retenir en premier lieu apparaissent en rouge ci-dessous.

EXCESS\_MODEL

**MAGNETIC\_ORDERING**

DEBYE\_HUCKEL

STATUS\_BITS

NEW\_CONSTITUENT

RENAME\_PHASE

**COMPOSITION\_SETS**

GLASS\_TRANSITION

DISORDERED\_PART

**MAJOR\_CONSTITUENT**

ZRO2\_TRANSITION

REMOVE\_ADDITIONS

QUASICHEM\_IONIC

QUASICHEM\_FACTOO

QUASICHEM\_IRSID

TERNARY\_EXTRAPOLAT

HKF\_ELECTROSTATIC

DEFAULT\_STABLE

SITE\_RATIOS

FRACTION\_LIMITS

permet d'introduire une contribution supplémentaire à l'enthalpie libre de la phase modélisant la stabilisation magnétique

# Définition des phases manquantes

ENTER\_PHASE C14\_LAVES

2

2

1

FE

TI

FE,TI

LIST\_PHASE C14

AMEND\_PHASE C14

?

MAJ

FE

TI

De nombreuses options existent pour la commande **AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION**. Celles à retenir en premier lieu apparaissent en rouge ci-dessous.

EXCESS\_MODEL

**MAGNETIC\_ORDERING**

DEBYE\_HUCKEL

STATUS\_BITS

NEW\_CONSTITUENT

RENAME\_PHASE

**COMPOSITION\_SETS**

GLASS\_TRANSITION

DISORDERED\_PART

**MAJOR\_CONSTITUENT**

ZRO2\_TRANSITION

REMOVE\_ADDITIONS

QUASICHEM\_IONIC

QUASICHEM\_FACTOO

QUASICHEM\_IRSID

TERNARY\_EXTRAPOLAT

HKF\_ELECTROSTATIC

DEFAULT\_STABLE

SITE\_RATIOS

FRACTION\_LIMITS

permet d'introduire une contribution supplémentaire à l'enthalpie libre de la phase modélisant la stabilisation magnétique

pour les phases présentant une lacune de miscibilité



# Définition des phases manquantes

ENTER\_PHASE C14\_LAVES

2

2

1

FE

TI

FE,TI

LIST\_PHASE C14

AMEND\_PHASE C14

?

MAJ

FE

TI

De nombreuses options existent pour la commande **AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION**. Celles à retenir en premier lieu apparaissent en rouge ci-dessous.

EXCESS\_MODEL

**MAGNETIC\_ORDERING**

DEBYE\_HUCKEL

STATUS\_BITS

NEW\_CONSTITUENT

RENAME\_PHASE

**COMPOSITION\_SETS**

GLASS\_TRANSITION

DISORDERED\_PART

**MAJOR\_CONSTITUENT**

ZRO2\_TRANSITION

REMOVE\_ADDITIONS

QUASICHEM\_IONIC

QUASICHEM\_FACTOO

QUASICHEM\_IRSID

TERNARY\_EXTRAPOLAT

HKF\_ELECTROSTATIC

DEFAULT\_STABLE

SITE\_RATIOS

FRACTION\_LIMITS

permet d'introduire une contribution supplémentaire à l'enthalpie libre de la phase modélisant la stabilisation magnétique

pour les phases présentant une lacune de miscibilité

pour définir une constitution par défaut

# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	EXIT	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	GOTO_MODULE	REINITIATE
BACK	HELP	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	INFORMATION	SET_INTERACTIVE
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	

Nous avons déjà utilisé la plupart des commandes importantes de GES

ENTER\_ELEMENT  
 AMEND\_ELEMENT\_DATA  
 LIST\_DATA  
 ENTER\_PHASE  
 LIST\_PHASE\_DATA  
 ENTER\_PARAMETER  
 LIST\_PARAMETER  
 LIST\_SYMBOLS  
 AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION

# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	EXIT	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	GOTO_MODULE	REINITIATE
BACK	HELP	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	INFORMATION	SET_INTERACTIVE
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	

Revenons sur la commande **LIST\_DATA** précédemment utilisée. Son utilisation peut faciliter la définition d'un système et des modèles de ses phases.

Elle possède, entre autres, deux options qui permettent de figer l'état du système dans des fichiers éditables.

Une fois la phase d'apprentissage passée pour laquelle l'utilisation interactive du mode console est préférable, l'édition de fichiers .TDB ou .TCM est généralement plus efficace.

# Commandes de GES

ADD_COMMENT	ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA
AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATUS
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
AMEND_PHASE_DESCRIPTION	EXIT	READ_GES_WORKSPACE
AMEND_SYMBOL	GOTO_MODULE	REINITIATE
BACK	HELP	SAVE_GES_WORKSPACE
CHANGE_STATUS	INFORMATION	SET_INTERACTIVE
DELETE	LIST_CONSTITUTION	SET_R_AND_P_NORM
ENTER_ELEMENT	LIST_DATA	
ENTER_PARAMETER	LIST_PARAMETER	

Revenons sur la commande **LIST\_DATA** précédemment utilisée. Son utilisation peut faciliter la définition d'un système et des modèles de ses phases.

`LIST_DATA file_name N ⇒ file_name.TDB`

`LIST_DATA file_name P ⇒ file_name.TCM`

Une fois le système, les phases et leurs modèles définis interactivement, en utilisant un TDB, un TCM, il faut définir les valeurs expérimentales que l'optimisation tentera de reproduire au plus près.

La définition de ces valeurs expérimentales nécessite l'utilisation du module **ED\_EXP**.

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
<b>BACK</b>	<b>HELP</b>	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	<b>INFORMATION</b>	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
<b>EXIT</b>	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

Commandes communes à plusieurs autres modules de Thermo-Calc

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	<b>INFORMATION</b>	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

## Commandes communes à POLY\_3



# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

## Commandes importantes propres à ED\_EXP

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

## Commandes importantes propres à ED\_EXP

Attention. Les commandes **READ\_WORKSPACES** et **SAVE\_WORKSPACES** sont différentes des commandes de même nom du module POLY\_3. Elles ne requièrent pas un nom de fichier. Elles chargent/modifient les équilibres liés à l'espace de travail PARROT courant.

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

Commandes propres à ED\_EXP de moindre importance

# ED\_EXP interactivement

```
SET_LOG opt
...
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE

?
1
LIST_EQ
```

# ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt
...
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE

?
1
LIST_EQ

```

La commande **CREATE\_NEW\_EQUILIBRIUM** est l'une des commandes clefs du module ED\_EXP.

Le numéro de l'équilibre constitue l'identifiant de l'équilibre. Il est incrémenté automatiquement par défaut mais l'utilisateur peut choisir un entier quelconque pas encore utilisé.

Le code d'initialisation initialise le statut des composants et des phases :

- ↪ 0 : constituants et phases suspendus
- ↪ 1 : constituants entrés, phases suspendues
- ↪ 2 : constituants et phases entrés

# ED\_EXP interactivement

```
SET_LOG opt
...
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE

?
1
LIST_EQ

LABEL
?
ALIQ
```

## ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt
...
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE

?
1
LIST_EQ

LABEL
?
ALIQ

```

La commande **LABEL** est optionnelle. Son utilisation est conseillée pour faciliter la gestion des équilibres de **ED\_EXP**.

Le label est constitué de au plus 4 caractères commençant par A.

## ED\_EXP interactivement

```
SET_LOG opt
```

```
...
```

```
MAC feti-setup
```

```
GO PAR
```

```
?
```

```
ED_EXP
```

```
?
```

```
CREATE
```

```
?
```

```
1
```

```
LIST_EQ
```

```
LABEL
```

```
?
```

```
ALIQ
```

```
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
```

```
SET_CONDITION T=1960 P=1E5 X(TI)=.05 N=1
```

```
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,
```

```
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,
```



## ED\_EXP interactivement

```
SET_LOG opt
...
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE
```

```
?
1
LIST_EQ
```

L'équilibre est défini en utilisant les commandes habituelles de POLY\_3.

```
LABEL
?
ALIQ
```

La commande SET\_CONDITION est légèrement différente puisqu'elle demande une incertitude sur les valeurs. Celle-ci est optionnelle et ne doit être utilisée que lors de fortes incertitudes sur les conditions expérimentales.

```
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960 P=1E5 X(TI)=.05 N=1

SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID, , ,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID, , ,
```

# ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt                EXPERIMENT HMR=-3229
...                        10%
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE

?
1
LIST_EQ

LABEL
?
ALIQ

CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960 P=1E5 X(TI)=.05 N=1

SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,

```

## ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt          EXPERIMENT HMR=-3229
...                 10%
MAC feti-setup
GO PAR
?
ED_EXP
?
CREATE              Elle définit aussi son incertitude. Celle-ci est nécessaire pour que
                    la commande soit prise en compte Elle peut être une valeur ab-
                    solue ou un pourcentage.

?
1
LIST_EQ             La grandeur dont la valeur est définie peut être une fonc-
                    tion prédéfinie par Thermo-Calc mais aussi toute fonction
                    préalablement définie par l'utilisateur.

LABEL
?
ALIQ               Plusieurs commandes EXPERIMENT peuvent être données pour un
                    même équilibre, par exemple la composition de deux phases, le
                    potentiel chimique de deux éléments, ... Des inégalités peuvent
                    également être utilisées, en particulier sur la force motrice d'une
                    phase pour assurer leur stabilité ou l'éviter.

CHANGE_STATUS PHASE LIQUI
SET_CONDITION T=1960 P=1E EXPERIMENT grandeur=valeur:incertitude

SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,

```

# ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt                EXPERIMENT HMR=-3229
...                        10%
MAC feti-setup
GO PAR                     LIST_EQ
?
ED_EXP
?                           COMPUTE_EQ
CREATE                     LIST_EQ

?
1
LIST_EQ

LABEL
?
ALIQ

CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960 P=1E5 X(TI)=.05 N=1

SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,

```

## ED\_EXP interactivement

```

SET_LOG opt          EXPERIMENT HMR=-3229
...                 10%
MAC feti-setup
GO PAR              LIST_EQ
?
ED_EXP
?                   COMPUTE_EQ
CREATE
                    LIST_EQ
?
1

```

```
LIST_EQ
```

Vous avez défini votre premier équilibre expérimental. Pour une optimisation, ce sont de nombreux équilibres qui doivent être introduits. Il est plus aisé et plus efficace d'éditer un fichier plutôt que de travailler interactivement.

```
LABEL
```

```
?
```

```
ALIQ
```

Par défaut, les fichiers contenant la définition des équilibres expérimentaux présentent une extension POP.

```

CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960 P=1E5 X(TI)=.05 N=1

```

```

SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID, , ,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID, , ,

```

# Fichiers .POP

L'un des avantages importants des fichiers .POP est l'utilisation de tableaux.

# Fichiers .POP

L'un des avantages importants des fichiers .POP est l'utilisation de tableaux.

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

Un tableau commence par la commande **TABLE\_HEAD** suivi du numéro identifiant le premier équilibre du tableau. Le numéro des équilibres suivants sera incrémenté de 1 automatiquement.



## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

**CREATE\_NEW\_EQUILIBRIUM** ne doit pas spécifier explicitement le numéro identifiant l'équilibre. Il est remplacé par le code @@.

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

@1 correspond à la valeur dans  
la colonne 1 du tableau.

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

@2 correspond à la valeur dans  
la colonne 2 du tableau.

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

Les valeurs du tableaux sont données  
après la commande **TABLE\_VALUES**.

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

La commande **TABLE\_END** ferme le tableau.

## Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID [84Bat]
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

Les lignes commençant par \$ sont des commentaires. Ils ne seront pas intégrés dans l'espace de travail. Ils facilitent l'édition du fichier, la documentation du travail et éventuellement une révision ultérieure.

# Fichiers .POP

```

$
TABLE_HEAD 25
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM @@,1
COMMENT Integral Enthalpy of mixing of LIQUID
LABEL ALIQ
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=ENT 1
SET_CONDITION T=1960,P=PO,X(TI)=@1,N=1
SET_REFERENCE_STATE FE LIQUID,,,,
SET_REFERENCE_STATE TI LIQUID,,,,
EXPERIMENT HMR=@2:510
TABLE_VALUES
$ XTi      Hm(J/mol)
$ [84Bat], Calculated from eqn., 25:32 values
$ X(Ti)    HMR
0.05  -3526.619
0.10  -6419.649
0.15  -8841.424
0.20  -10926.360
0.25  -12780.990
0.30  -14483.900
0.35  -16085.820
0.40  -17609.530
TABLE_END

```

La commande **COMMENT** permet d'intégrer des commentaires dans l'espace de travail. Ils apparaîtront par exemple dans la sortie de la commande **LIST\_EQUILIBRIUM**. Ils ont une taille réduite et la commande ne peut pas être utilisée interactivement.

Les lignes commençant par **\$** sont des commentaires. Ils ne seront pas intégrés dans l'espace de travail. Ils facilitent l'édition du fichier, la documentation du travail et éventuellement une révision ultérieure.

## Fichiers .POP

Un fichier .POP est intégré à l'espace de travail d'optimisation par la commande **COMPILE\_EXPERIMENTS** du module PARROT. Des vérifications succinctes (noms des phases, cohérence avec les modèles, unicité du numéro identifiant d'équilibre, ...) sont faites. Avant cela un espace de travail doit être créé.

Les différents équilibres qu'il définit doivent ensuite être calculés au sein du module ED\_EXP pour pouvoir être utilisées au cours de l'optimisation. Afin d'avoir accès à ces équilibres la commande **READ\_WORKSPACES** doit être donnée dans ED\_EXP avant toute autre commande. Il est alors fréquent de voir apparaître des erreurs. L'utilisateur peut y remédier interactivement. Il est recommandé de modifier le fichier .POP également. Avant de retourner dans PARROT, la commande **SAVE\_WORKSPACES** est impérative afin de prendre en compte les actions effectuées dans ED\_EXP.

En cours d'optimisation, l'utilisateur fait aussi fréquemment des interventions interactives dans ED\_EXP. Il peut par exemple modifier le poids d'un équilibre, introduire un équilibre fictif pour remédier à un comportement problématique dans un domaine où il n'y a pas de données expérimentales, ... Il est aussi recommandé de modifier le fichier .POP pour garder trace de ces modifications. Même s'il existe une commande **MAKE\_POP\_FILE** dans ED\_EXP, elle produit des fichiers qui ne sont pas exempts d'erreurs et assez éloignés de la structure initiale puisque chaque équilibre apparaît comme équilibre singulier (plus de tableaux) avec une valeur de départ pour toutes les valeurs de constitution, quantité des phases entrées, P et T non fixées...



# ED\_EXP

Toujours dans la session précédente

# ED\_EXP

Toujours dans la session précédente

BACK

?

CREATE\_NEW\_STORE\_FILE feti

COMPILE feti

ED\_EXP

REA

SEL 1

COMPUTE\_EQ

LIST\_EQ

COMPUTE\_ALL

## ED\_EXP

BACK

?

CREATE\_NEW\_STORE\_FILE feti

COMPILE feti

ED\_EXP

REA

SEL 1

COMPUTE\_EQ

LIST\_EQ

COMPUTE\_ALL

ED\_EXP:c\_a

... the command in full is COMPUTE\_ALL\_EQUILIBRIA

Eq	Lab	Iter	Weight	Temp	Exp	Fix phases or comments
1	ALIQ	9	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
2	ALIQ	8	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
3	ALIQ	8	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
4	ALIQ	8	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
5	ALIQ	7	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
6	ALIQ	7	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
7	ALIQ	7	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
8	ALIQ	6	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
9	ALIQ	6	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
10	ALIQ	6	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
11	ALIQ	6	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
12	ALIQ	5	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
13	ALIQ	5	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
14	ALIQ	5	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
15	ALIQ	4	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
16	ALIQ	4	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
17	ALIQ	4	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
18	ALIQ	3	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
19	ALIQ	4	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
25	ALIQ	9	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
26	ALIQ	8	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
27	ALIQ	7	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
28	ALIQ	7	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
29	ALIQ	6	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
30	ALIQ	5	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
31	ALIQ	4	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
32	ALIQ	3	1.	1960.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [84BAT]
35	ALIQ	10	1.	1873.0		INTEGRAL ENTHALPY OF MIXING OF LIQUID [91WAN]

## ED\_EXP

BACK

?

CREATE\_NEW\_STORE\_FILE feti

COMPILE feti

ED\_EXP

REA

SEL 1

COMPUTE\_EQ

LIST\_EQ

COMPUTE\_ALL

```

513 AA2  2  1.  1600.0  ROBINSON AND ARGENT (1976) BCC_4S
*** ERROR 1609 IN QEQUIL
*** NO PHASE WITH VARIABLE AMOUNT, PLEASE USE SET_ALL_START_VAL
ED_EXP:LIS_EQ
... the command in full is LIST_EQUILIBRIUM
C14 congruent melting
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:
Options /WC/S/:
Output from POLY-3, equilibrium = 700, label AC14, database: User dat

Conditions:
P=P0, X(LIQUID, TI)-X(C14_LAVES, TI)=0, N=1
FIXED PHASES
LIQUID=0
DEGREES OF FREEDOM 0

Temperature 1700.00 K ( 1426.85 C), Pressure 1.000000E+05
Number of moles of components 0.00000E+00, Mass in grams 0.00000E+00

Component           Moles      W-Fraction  Activity   Potential  Ref.stat
FE                   0.0000E+00 0.0000E+00 1.0000E+00 0.0000E+00 SER
TI                   0.0000E+00 0.0000E+00 1.0000E+00 0.0000E+00 SER

LIQUID              Status FIXED      Driving force 0.0000E+00
Moles 0.0000E+00, Mass 0.0000E+00, Volume fraction 0.0000E+00 Mass fractions:
FE 5.35954E-01 TI 4.64046E-01

SET_WEIGHT 2,,,
EXPERIMENT T=1698:5.7 $0:0 NO=1
EXPERIMENT X(TI)=0.329:5E-3 $0:0 NO=2

```

## ED\_EXP

Cet équilibre ne peut pas être calculé dans l'état présent de la description. Il s'agit de la fusion congruente de la phase C14 et cette phase n'est pas stable pour l'instant. Commençons l'optimisation en ne considérant que les équilibres impliquant uniquement la phase liquide.

BACK

?

CREATE\_NEW\_STORE\_FILE feti

COMPILE feti

ED\_EXP

REA

SEL 1

COMPUTE\_EQ

LIST\_EQ

COMPUTE\_ALL

LIST\_EQ

```

513 AA2  2  1.  1600.0  ROBINSON AND ARGENT (1976) BCC_4S
*** ERROR 1609 IN QEQUIL
*** NO PHASE WITH VARIABLE AMOUNT, PLEASE USE SET_ALL_START_VAL
ED_EXP:LIS_EQ
... the command in full is LIST_EQUILIBRIUM
C14 congruent melting
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:
Options /WCS/:
Output from POLY-3, equilibrium = 700, label AC14, database: User dat

Conditions:
P=PO, X(LIQUID, TI)-X(C14_LAVES, TI)=0, N=1
FIXED PHASES
LIQUID=0
DEGREES OF FREEDOM 0

Temperature 1700.00 K ( 1426.85 C), Pressure 1.000000E+05
Number of moles of components 0.00000E+00, Mass in grams 0.00000E+00

Component           Moles      W-Fraction  Activity   Potential  Ref.stat
FE                   0.0000E+00 0.0000E+00 1.0000E+00 0.0000E+00 SER
TI                   0.0000E+00 0.0000E+00 1.0000E+00 0.0000E+00 SER

LIQUID                Status FIXED      Driving force 0.0000E+00
Moles 0.0000E+00, Mass 0.0000E+00, Volume fraction 0.0000E+00 Mass fractions:
FE 5.35954E-01 TI 4.64046E-01

SET_WEIGHT 2,,,
EXPERIMENT T=1698:5.7 $0:0 NO=1
EXPERIMENT X(TI)=0.329:5E-3 $0:0 NO=2

```

## ED\_EXP

```
BACK  
?  
CREATE_NEW_STORE_FILE feti  
  
COMPILE feti
```

```
SET_WEIGHT 0  
?  
  
SET_WEIGHT 0 1-L  
SET_WEIGHT 1 ALIQ
```

```
ED_EXP  
REA
```

```
SEL 1  
COMPUTE_EQ  
LIST_EQ
```

```
COMPUTE_ALL
```

```
LIST_EQ
```

## ED\_EXP

```
BACK  
?  
CREATE_NEW_STORE_FILE feti  
  
COMPILE feti
```

```
ED_EXP  
REA
```

```
SEL 1  
COMPUTE_EQ  
LIST_EQ
```

```
COMPUTE_ALL
```

```
LIST_EQ
```

```
SET_WEIGHT 0  
?  
  
SET_WEIGHT 0 1-L  
SET_WEIGHT 1 ALIQ
```

La commande **SET\_WEIGHT** permet de modifier le poids d'un équilibre ou d'un groupe d'équilibre identifié par un label ou par un intervalle de numéro.

## ED\_EXP

```
BACK  
?  
CREATE_NEW_STORE_FILE feti
```

```
COMPILE feti
```

```
ED_EXP  
REA
```

```
SEL 1  
COMPUTE_EQ  
LIST_EQ
```

```
COMPUTE_ALL
```

```
LIST_EQ
```

```
SET_WEIGHT 0  
?
```

```
SET_WEIGHT 0 1-L  
SET_WEIGHT 1 ALIQ
```

```
SELECT 1  
COMPUTE_ALL  
SAVE  
BACK
```



# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

Toutes les commandes importantes de ED\_EXP ont été introduites.

# Commandes de ED\_EXP

ADVANCED_OPTIONS	GRAPHICS_PLOT	SELECT_EQUILIBRIUM
BACK	HELP	SET_ALL_START_VALUES
CHANGE_STATUS	IMPORT	SET_ALTERNATE_CONDITION
COMMENT	INFORMATION	SET_CONDITION
COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA	LABEL_DATA	SET_NUMERICAL_LIMITS
COMPUTE_EQUILIBRIUM	LIST_ALL_EQUILIBRIA	SET_REFERENCE_STATE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	LIST_CONDITIONS	SET_START_CONSTITUTION
DEFINE_COMPONENTS	LIST_EQUILIBRIUM	SET_START_VALUE
DELETE_SYMBOL	LIST_STATUS	SET_WEIGHT
ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS	SHOW_VALUE
EVALUATE_FUNCTIONS	MAKE_POP_FILE	STORE_ALL_WEIGHTS
EXIT	READ_WORKSPACES	TABLE_HEAD
EXPERIMENT	REINITIATE_MODULE	TRANSFER_START_VALUES
EXPORT	RESTORE_ALL_WEIGHTS	
FLUSH_BUFFER	SAVE_WORKSPACES	

Toutes les commandes importantes de ED\_EXP ont été introduites.

Il est temps de passer au module d'optimisation, PARROT

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
<b>BACK</b>	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	<b>SET_INTERACTIVE</b>
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	<b>MACRO_FILE_OPEN</b>	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
<b>EXIT</b>	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
<b>GOTO_MODULE</b>	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
<b>HELP</b>	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
<b>INFORMATION</b>	REINITIATE	

Commandes communes à plusieurs autres modules de Thermo-Calc

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	<b>SET_INTERACTIVE</b>
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes communes à GES.

A noter qu'il manque quelques commandes importantes de GES comme ENTER\_ELEMENT, ENTER\_PHASE ou ENTER\_SYMBOL.

Ceci implique la définition préalable du système :

- soit dans le module GES, interactivement ou via une macro,
- soit dans le module TDB en utilisant un fichier .TDB.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

Commandes importantes de PARROT.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

**CREATE\_NEW\_STOREFILE** pour créer un espace de travail.



# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

**CREATE\_NEW\_STOREFILE** pour créer un espace de travail.

Le fichier généré est un fichier binaire, d'extension **PAR** par défaut.

Le nom du fichier courant est donné par la commande **LIST\_STORE\_FILE**.

Un tel fichier peut être chargé comme espace de travail au cours d'une nouvelle session grâce à la commande **SET\_STORE\_FILE**.

La commande **READ\_PARROT\_WORKSPACES** sert à revenir à l'état de l'espace de travail au moment du dernier **SAVE\_PARROT\_WORKSPACES**.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

**CREATE\_NEW\_STOREFILE** pour créer un espace de travail.

**COMPILE\_EXPERIMENTS** pour intégrer les équilibres d'un fichier POP dans l'espace de travail.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

**CREATE\_NEW\_STOREFILE** pour créer un espace de travail.

**COMPILE\_EXPERIMENTS** pour intégrer les équilibres d'un fichier POP dans l'espace de travail.

**EDIT\_EXPERIMENTS** pour atteindre le sous-module ED\_EXP.

# Commandes de PARROT

AMEND_PARAMETER	LIST_ALL_VARIABLES	RESCALE_VARIABLES
AMEND_SYMBOL	LIST_CONDITIONS	SAVE_PARROT_WORKSPACES
BACK	LIST_PARAMETER	SET_ALTERNATE_MODE
COMPILE_EXPERIMENTS	LIST_PHASE_DATA	SET_EXTERNAL_PARAMETER
CONTINUE_OPTIMIZATION	LIST_RESULT	SET_FIX_VARIABLE
CREATE_NEW_STORE_FILE	LIST_STORE_FILE	SET_INTERACTIVE
EDIT_EXPERIMENTS	LIST_SYMBOL_IN_GES	SET_OPTIMIZING_CONDITION
ENTER_PARAMETER	MACRO_FILE_OPEN	SET_OPTIMIZING_VARIABLE
EXIT	OPTIMIZE_VARIABLES	SET_OUTPUT_LEVELS
GOTO_MODULE	READ_PARROT_WORKSPACES	SET_SCALED_VARIABLE
HELP	RECOVER_VARIABLES	SET_STORE_FILE
INFORMATION	REINITIATE	

## Commandes importantes de PARROT.

Certaines ont déjà été utilisées.

**CREATE\_NEW\_STOREFILE** pour créer un espace de travail.

**COMPILE\_EXPERIMENTS** pour intégrer les équilibres d'un fichier POP dans l'espace de travail.

**EDIT\_EXPERIMENTS** pour atteindre le sous-module ED\_EXP.

Les autres commandes importantes sont plus directement liées au processus d'optimisation.

## PARROT

```
?  
LIST_PHASE LIQUID
```

```
ENTER_PARAMETER  
L(LIQUID,FE,TI;0)
```

```
V1+V2*T;
```

```
LIST_PHASE
```

```
ENTER_PARAMETER  
L(LIQUID,FE,TI;1)
```

```
V3+V4*T;
```

# PARROT

```
?
LIST_PHASE LIQUID
```

```
ENTER_PARAMETER
L(LIQUID,FE,TI;0)
```

```
V1+V2*T;
```

```
LIST_PHASE
```

```
ENTER_PARAMETER
L(LIQUID,FE,TI;1)
```

```
V3+V4*T;
```

Une centaine de variables sont susceptibles d'être optimisées. Leur nom est constitué d'un **V** suivi d'un entier entre 1 et 99. Leur utilisation en dehors d'un espace de travail de type PAR génère des erreurs. Leur valeur est initialement nulle. Les commandes **SET\_FIX\_VARIABLE** et **SET\_OPTIMIZING\_VARIABLE** permettent de leur donner une autre valeur. La commande **SET\_OPTIMIZING\_VARIABLE** permet d'optimiser la variable par la suite.

## PARROT

?	S_O_V 1
LIST_PHASE LIQUID	
	L_A_V
ENTER_PARAMETER	
L(LIQUID,FE,TI;0)	OPTIMIZE
	0
V1+V2*T;	L_A_V
LIST_PHASE	L_R
ENTER_PARAMETER	OP
L(LIQUID,FE,TI;1)	10
	L_A_V
V3+V4*T;	
	RESCALE
	L_A_V
	OP 10
	L_A_V

## LIST\_RESULT C

188	MUR(TI)=-1971.465	-1641.	2.37E+02	330.7	1.398	
188	MUR(FE)=-79017.599	-3.5858E+04	9.48E+03	4.3159E+04	4.552	
190	EMF=-210	-383.7	21.	-173.7	-8.272	*
191	EMF=-245	-407.9	25.	-162.9	-6.647	*
192	EMF=-268	-435.9	27.	-167.9	-6.265	*
193	EMF=-285	-446.1	28.	-161.1	-5.653	*
200	MUR(FE)=-1829.591	-1593.	3.66E+02	237.0	0.6476	
200	MUR(TI)=-69778.014	-3.4805E+04	1.40E+04	3.4973E+04	2.506	
201	MUR(FE)=-5437.925	-3373.	1.09E+03	2065.	1.899	
201	MUR(TI)=-49054.085	-2.4328E+04	9.81E+03	2.4726E+04	2.520	
202	MUR(FE)=-9024.97	-5391.	1.80E+03	3634.	2.013	
202	MUR(TI)=-38584.374	-1.8199E+04	7.72E+03	2.0385E+04	2.642	
203	MUR(FE)=-14049.79	-7722.	2.81E+03	6328.	2.252	
203	MUR(TI)=-29098.506	-1.3850E+04	5.82E+03	1.5248E+04	2.620	
204	MUR(FE)=-21121.528	-1.0477E+04	4.22E+03	1.0644E+04	2.520	

La commande **LIST\_RESULT C** donne pour chaque **EXPERIMENT**

- ↪ le numéro de l'équilibre
- ↪ grandeur et valeur expérimentale
- ↪ valeur calculée
- ↪ incertitude pondérée (divisée par le poids de l'équilibre au carré)
- ↪ écart entre valeur expérimentale et valeur calculée
- ↪ écart/incertitude pondérée
- ↪ \* lorsque la colonne précédente est  $> 5$ , lorsqu'elle est  $> 100$

C'est le carré de la valeur de la dernière colonne qui donne la contribution de l'**EXPERIMENT** à la somme des carrés qui est minimisée.



# LIST\_ALL\_VARIABLES

```

PARROT: l_a_v
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.   VALUE           START VALUE       SCALING FACTOR   REL.STAND.DEV
V1     -6.86718259E+04    -6.86718259E+04  -6.86718259E+04  7.96458106E-03

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1
ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO
THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 4.30899728E+02 TO 4.30899728E+02
DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56487933E+00

```

La dernière colonne (RSD) de la commande **LIST\_ALL\_VARIABLES** permet d'arrondir efficacement une variable. Si elle est de l'ordre de E-03, conserver 3 chiffres significatifs n'impacte pas significativement la somme des carrés. La valeur n'évoluera pas à moins de changer les conditions d'optimisation (nouveaux poids, équilibres supplémentaires, variables supplémentaires, ...)

Il faut avoir effectué **RESCALE** et **OPTIMIZE** pour que cette valeur ait un sens. Valeur courante et valeur de départ doivent être proches.

# LIST\_ALL\_VARIABLES

```

PARROT: l_a_v
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.   VALUE           START VALUE       SCALING FACTOR   REL.STAND.DEV
V1     -6.86718259E+04    -6.86718259E+04  -6.86718259E+04  7.96458106E-03

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1
ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO
THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 4.30899728E+02 TO 4.30899728E+02
DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56487933E+00

```

La dernière colonne (RSD) de la commande **LIST\_ALL\_VARIABLES** permet d'arrondir efficacement une variable. Si elle est de l'ordre de E-03, conserver 3 chiffres significatifs n'impacte pas significativement la somme des carrés. La valeur n'évoluera pas à moins de changer les conditions d'optimisation (nouveaux poids, équilibres supplémentaires, variables supplémentaires, ...)

Il faut avoir effectué **RESCALE** et **OPTIMIZE** pour que cette valeur ait un sens. Valeur courante et valeur de départ doivent être proches.

Les variables qui, en fin d'optimisation, ont une RSD > 1 n'ont pas d'influence sur la description. Elles doivent être supprimées.

## LIST\_ALL\_VARIABLES

```

PARROT:l_a_v
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.  VALUE          START VALUE      SCALING FACTOR  REL.STAND.DEV
V1    -6.86718259E+04  -6.86718259E+04  -6.86718259E+04  7.96458106E-03

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1
ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO
THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 4.30899728E+02 TO 4.30899728E+02
DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56487933E+00
PARROT:s_o_v 1 -68700
PARROT:o 0
Use 169 experiments, maximum is 2000
Use 512 real workspace, maximum is 50000
PARROT:l_a_v
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.  VALUE          START VALUE      SCALING FACTOR  REL.STAND.DEV
V1    -6.87000000E+04  -6.87000000E+04  -6.87000000E+04  0.00000000E+00

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1
ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO
THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 0.00000000E+00 TO 4.30902381E+02
DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56489513E+00

```

## LIST\_ALL\_VARIABLES

PARROT:l\_a\_v

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.	VALUE	START VALUE	SCALING FACTOR	REL.STAND.DEV
V1	-6.86718259E+04	-6.86718259E+04	-6.86718259E+04	7.96458106E-03

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1

ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO

THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 4.30899728E+02 TO 4.30899728E+02

DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56487933E+00

PARROT:l\_a\_v

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR.	VALUE	START VALUE	SCALING FACTOR	REL.STAND.DEV
V1	-6.87000000E+04	-6.87000000E+04	-6.87000000E+04	7.96131475E-03

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 1

ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO

THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 4.30902381E+02 TO 4.30902381E+02

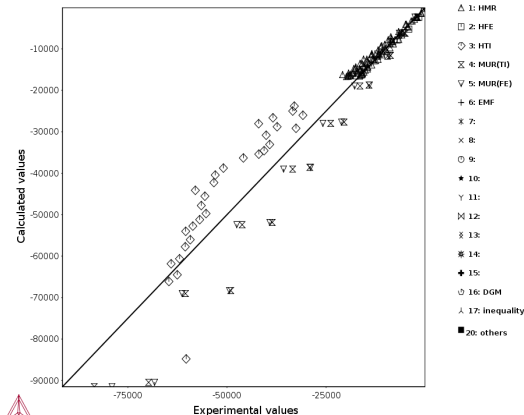
DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56489513E+00

THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 0.00000000E+00 TO 4.30902381E+02

DEGREES OF FREEDOM 168. REDUCED SUM OF SQUARES 2.56489513E+00

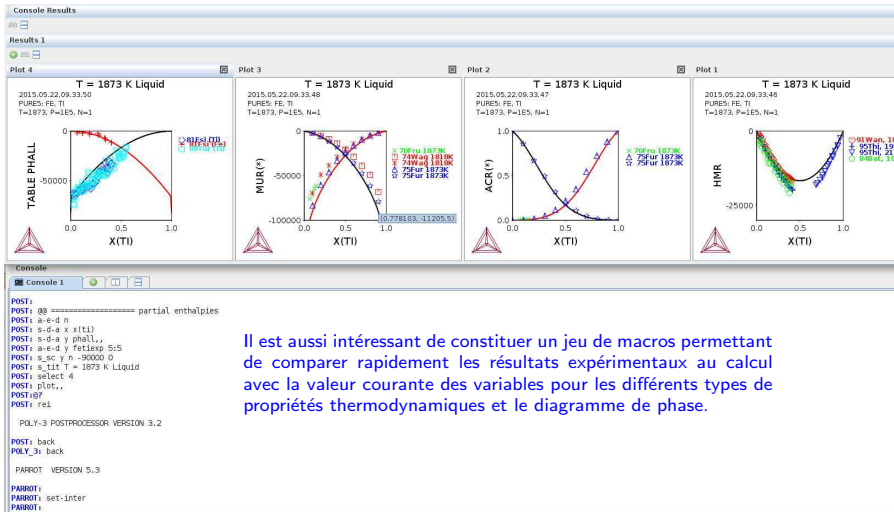
## LIST\_RESULT G

From PARROT optimization

2015.05.22.08.27.40  
PURES: FE, TI

La commande **LIST\_RESULT G** génère un fichier `.exp` et affiche dans le module POST la comparaison graphique des valeurs expérimentales et calculées. Elle permet de comparer rapidement l'accord avec deux jeux de variables.

## MACROS



Toutes les commandes nécessaires ont maintenant été introduites.

Faire une nouvelle optimisation en optimisant aussi V2.

Utiliser L\_A\_V pour suivre l'évolution des variables, de la somme des carrés, L\_R, la macro liq.TCM.

Considérer également V3, ...

Changer les poids de certains équilibres.

Toutes les commandes nécessaires ont maintenant été introduites.

Faire une nouvelle optimisation en optimisant aussi V2.

Utiliser L\_A\_V pour suivre l'évolution des variables, de la somme des carrés, L\_R, la macro liq.TCM.

Considérer également V3, ...

Changer les poids de certains équilibres.

Pour continuer la description, il faut, de manière itérative:

- ↪ introduire de nouvelles variables dans la description d'une autre phase,
- ↪ introduire une valeur de départ pour ces nouvelles variables,
- ↪ changer le poids des équilibres impliquant cette autre phase,
- ↪ calculer l'ensemble des équilibres - ceux qui ne peuvent pas être calculés ne doivent pas être considérés -
- ↪ sauver et entreprendre une nouvelle optimisation

jusqu'à ce que l'ensemble des équilibres soient correctement décrits.



## Pour approfondir

- ▶ Dans le dossier d'installation de Thermo-Calc, sous Manuals
  - Data Optimisation User Guide for Thermo-Calc.pdf
  - DATAPLOT\_UsersGuide\_Examples.pdf
  - Thermo-Calc-Console-Examples.html, exemple 36
  - Thermo-Calc Console Mode Command Reference.pdf
  - Thermo-Calc Console Mode User Guide.pdf
  - Thermo-Calc Database Manager Guide.pdf
- ▶ Computational Thermodynamics, The Calphad Method, Hans Leo Lukas, Suzana G. Fries, Bo Sundman, ISBN 978-0-521-86811-2
- ▶ <http://nathdupin.free.fr/public/Lectures/GRE-ND-2008.pdf>