توضیحات فایل های ترمودینامیک پیشرفته:

الف\_1 Main\_

ورودی ها:

1\_ درصد ترکیب در ماتریس Nc در 1 به نام Comp

2\_ دمای بحرانی سازنده های ترکیب در ستون اول یک ماتریس Nc در 4 به نام Props

3\_ فشار بحرانی اجزای سازنده ترکیب در ستون دوم یک ماتریس Nc در 4 به نام Props

4\_ ضرایب ABCD که از جدول C1 کتاب اسمیت باید استخراج بشه و هنوز روی LMS نرفته

5\_ برهم کنش بین اجزا که یک ماتریس Nc در Nc است، و در اینجا فعلا صفر درنظر گرفته شده

6\_ دمای ترکیب Temp

7\_ فشار ترکیب Press

8\_ فاز ترکیب

ماحصل:

Main با فراخوانی Eos\_cal و داده هایی که دارد، q, Beta, phi و z را به دست می دهد.

الف\_2\_ Eos\_cal :

مراحل:

1\_ Rgas, Sigma, Epsilon, Omega و Si را گرفته و با توجه به رابطه ی تعریف شده (همه ی این آیتم ها ثابت های EOS استفاده شده در این کد است) و سایر داده های مذکور مورد نیازموجود در Main مقدار a(ic) و b(ic) (طبیعتا به تعداد Nc ها، a و b داریم) را به دست می دهد. (گام 21\_1)

2\_ طی گام های (34\_22) مقادیر qfc, amix, bmix (amix و bmix تابعی تجمیعی یا سیگمایی از a ها و b هاست و برای محاسبه qfc مقدار amix و bmix مورد نیاز است) را طبق روابط مذکور محاسبه می کند.

توضیح: در واقع amix, bmix و qfc شخصیت اجزای سازنده ترکیب را از طریق ملاک قرار دادن دما و فشار بحرانی آنها وارد معادله ی حالت می کند.

3\_ طی گام های (34\_22) Z را با توجه به مایع یا گاز بودن از طریق حدس اولیه دقت مورد قبول محاسبه می کند.

4\_ طی گام های (64\_34)برای محاسبه ی Phi ابتدا qbar و I را محاسبه و بعد فوگاسیته ی هر جزء ترکیب را محاسبه می‌کند.

ب\_

در فایل سوم خواسته شده مقدار deltaH رو از نقطه ی k200 تا دمای دلخواه برای همین درصذ ترکیب با فرض ایده آلی رفتار ترکیب و به ازای تعداد مول دلخواه کدنویسی کنیم.