

FortranWorkshop

Día 2: Conceptos básicos de yaeos y cálculos de propiedades termodinámicas

github.com/ipqa-research/yaeos

Elementos principales de yaeos


- ArModel
 - CubicEoS
 - CubicMixRule
 - AlphaFunction
- GeModel
 - NRTL
 - UNIFAC
- EquilibriumState
- PTEnvel2

ArModel

- Es un tipo especial que generaliza los cálculos de manera agnóstica a los modelos.
- Dentro de de examples/basics/1_basics.f90 pueden verse todas las propiedades que pueden calcularse directamente con un ArModel

```
class(ArModel), allocatable :: model  
model = PengRobinson76(Tc, Pc, w, kij, lij)  
call model%pressure(n, V, T, P)
```

models_ar

 ArModel

Def. generica de un modelo de energia residual de Helmholtz. Se definen las distintas funciones que se pueden calcular

• Constants

- Cp_residual_vt(n, V, T)
- Cv_residual_vt(n, V, T)
- gibbs_residual_vt(n, V, T)
- enthalpy_residual_vt(n, V, T)
- lnphi_pt(n, P, T)
- lnphi_vt(n, V, T)
- volume(n, P, T)

Distintos modelos Ar actualmente implementados

- CubicEoS: Es un ArModel que internamente contiene
 - alpha: AlphaFunction -> Funciones Alpha
 - mixrule: CubicMixrule -> Regla cúbica de mezclado
 - ac, b, delta1, delta2
- Existen funciones que setean CubicEoS a modelos particulares
 - PengRobinson76(Tc, Pc, w, [kij, lij])
 - PengRobinson78(Tc, Pc, w, [kij, lij])
 - SoaveRedlichKwong(Tc, Pc, w, [kij, lij])
 - RKPR(Tc, Pc, w, Zc, [kij, lij, delta1, k])

```
class(ArModel), allocatable :: model  
model = PengRobinson76(Tc, Pc, w, kij, lij)  
call model%pressure(n, V, T, P)
```

cubic_eos

implementations

I PengRobinson76

I PengRobinson78

I SoaveRedlichKwong

I RKPR

C QMR

Reglas de mezclado cuadraticas con kij y lij
• k, l

C MHV

Reglas de mezclado Modified-Huron-Vidal de Michelsen
se define con un modelo Ge y parametros repulsivos de puros
• ge, bi, l

C AlphaFunction

• alpha(Tr)

C MixingRule

• Dmix, Bmix, D1mix

C CubicEoS

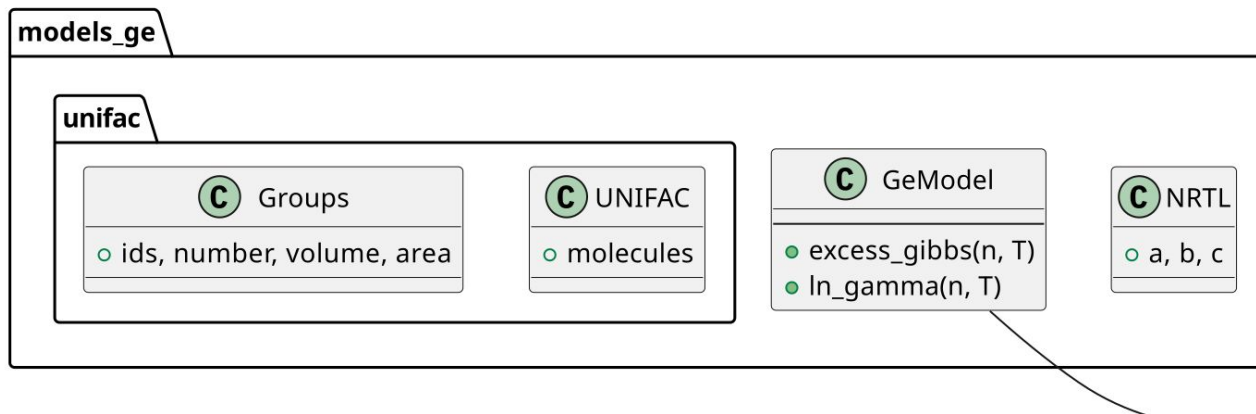
Una ecuacion cubica tiene su conjunto de parametros, regla de mezclado y funcion alfa
• ac, b, delta1, delta2
• MixingRule
• AlphaFunction
• volume



GeModel

Modelos de energía de Gibbs de Exceso. Por el momento solo permiten calcular G_e con todas sus derivadas (primeras y segundas) y coeficientes de actividad.

- UNIFAC
 - Groups
- NRTL



Equilibrio de fases

Yaeos tiene las funciones de equilibrio de fases de distinto tipo.

Para equilibrios bifásicos todo se basa en el tipo EquilibriumState

- saturation_temperature
- saturation_pressure
- Flash (model, n, [P, V], T)
- pt_envelope_2ph

Todas estas funciones reciben un ArModel y algún tipo de especificación

