


Equação de Estado Cúbica Genérica com Regras de Mistura Clássicas

$$P = \frac{RT}{\boxed{V} - b} - \frac{\theta}{(V + \sigma b)(V + \epsilon b)},$$

onde

$$\boxed{b} = \sum_{i=1}^{n_c} x_i b_i$$

$$\boxed{\theta} = \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{n_c} x_i x_j (\theta_i \theta_j)^{1/2} (1 - \delta_{ij})$$

Os parâmetros σ , ϵ , b_i e θ_i são obtidos para cada substância i de acordo com a tabela fornecida anteriormente. O método de cálculo do volume molar da mistura e das propriedades molares residuais H^R e S^R é idêntico ao utilizado para substâncias puras. 

Coefficiente de Fugacidade de um Componente da Mistura

Após obtido o volume molar da mistura, calcula-se:

$$\ln \hat{\phi}_i = \frac{\bar{B}_i}{b} \left(\frac{PV}{RT} - 1 \right) - \ln \frac{P(V-b)}{RT} - \frac{\theta}{RT} \left(\frac{2\bar{\Theta}_i}{\theta} - \frac{\bar{B}_i}{b} \right) \psi$$

onde

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{b(\epsilon - \sigma)} \ln \frac{V + \epsilon b}{V + \sigma b} & \text{se } \epsilon \neq \sigma \\ \frac{1}{V + \sigma b} & \text{se } \epsilon = \sigma \end{cases},$$

Para as regras de mistura clássicas, tem-se que:

$$\boxed{\bar{B}_i} = b_i$$

$$\bar{\Theta}_i = \theta_i^{1/2} \sum_{j=1}^{n_c} x_j \theta_j^{1/2} (1 - \delta_{ij}).$$