



Sindri

Uma nova ferramenta computacional para a estimativa de propriedades termodinâmicas e cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Marcus Bruno Fernandes Silva

Orientador: Nathan Sombra Evangelista

Lavras – MG

Julho, 2019

1

Introdução

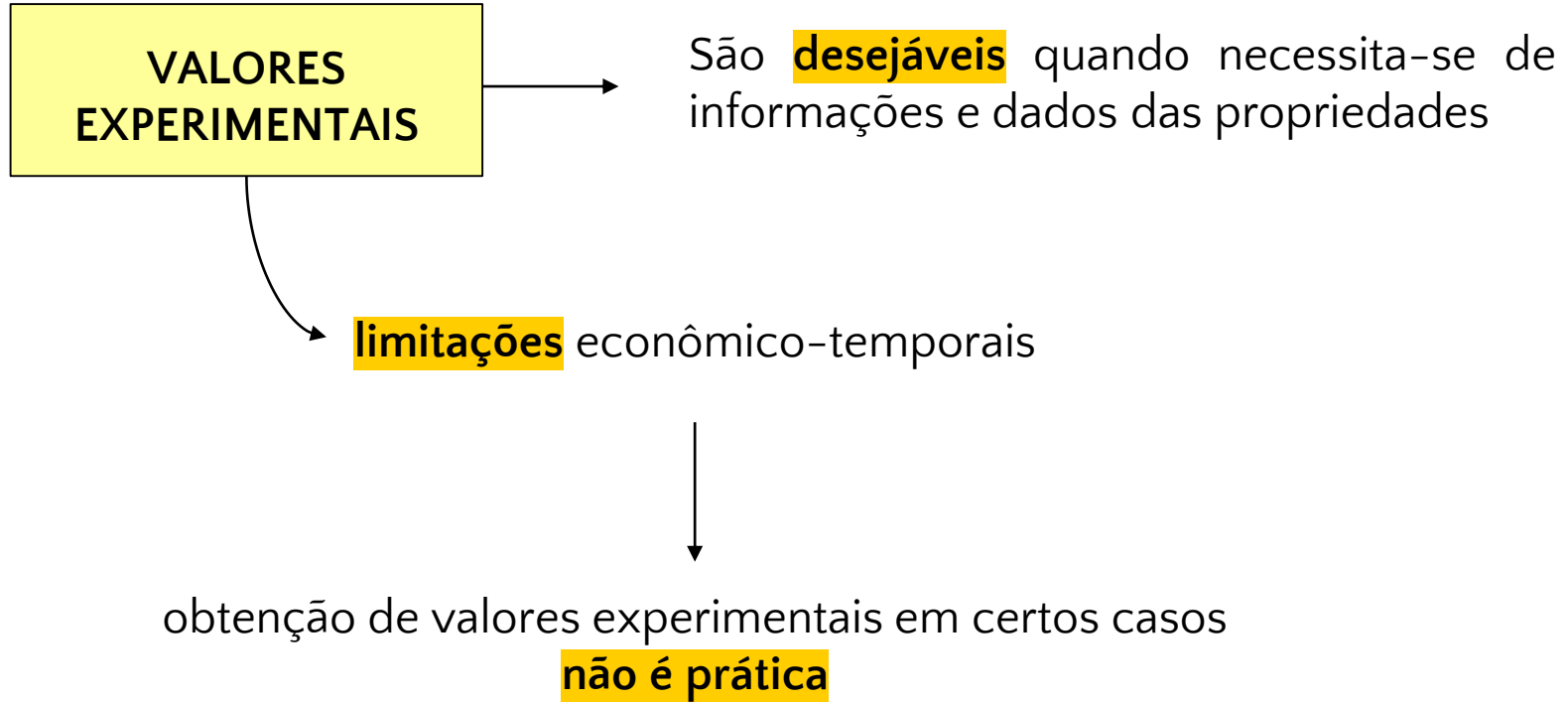
Um engenheiro civil não é capaz de projetar uma ponte sem antes conhecer as propriedades do aço e do concreto. Analogamente, cientistas e engenheiros muitas vezes necessitam dos conhecimentos das propriedades de gases e líquidos (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001).

Propriedades termodinâmicas e dados de equilíbrio de fases

Projeto de processos, produtos, equipamentos

Dados de **equilíbrio de fases** (diagramas e tabelas) são essenciais para o dimensionamento de processos de separação de fases não-mecânicos

1. Introdução

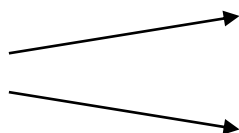


1. Introdução



A **termodinâmica** não é capaz de fornecer os valores dessas propriedades, mas sim **relações** entre elas

TERMODINÂMICA



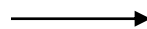
Valores das propriedades



Relações entre as propriedades



Cientistas e engenheiros utilizam essa ferramenta para contornar a escassez de informações de propriedades e dados relevantes



**Modelos termodinâmicos,
equações e correlações**

Por questões de **velocidade de execução** e **facilidade de uso**, softwares e programas computacionais foram desenvolvidos para aplicação e resolução desses modelos termodinâmicos ao longo das últimas décadas

Código fechado

- PRZ e VLMU (Sandler, 1999)
- PRPURE e PRMIX (Elliot e Lira, 1999)
- VRTherm (VRTech, 2004)
- Thermosolver (Koretsky, 2007)

Código aberto

- EOSC (do Carmo, 2010)
- XSEOS (Castier e Amer, 2011)
- OCTOPUS (Evangelista *et al.*, 2016)

Limitações dos softwares e programas computacionais

- A maioria dos softwares utilizados são comerciais e de código fechado;
- Interface gráfica limitada ou ausente;
- Não intuitivos;
- Não geram relatórios e diagramas interativos.



Uma nova **alternativa**



Sindri

OBJETIVOS

Desenvolver um software capaz de estimar propriedades termodinâmicas e dados de equilíbrio com as seguintes características:

- Possuir interface gráfica intuitiva e amigável;
- Possuir banco de dados com uma grande quantidade de substâncias de interesse;
- Possuir uma variedade de equações de estado cúbicas implementadas;
- Efetuar cálculos de equilíbrio líquido-vapor por meio das abordagens $\phi - \phi$ e $\gamma - \phi$;
- Resolver problemas clássicos de equilíbrio líquido-vapor: ponto de bolha, ponto de orvalho, flash PT;
- Gerar relatórios dos cálculos e diagramas de fases interativos;
- Calcular informações requeridas para um sistema com número de componentes arbitrários.

2

Conceitos

Equação de estado cúbica

É uma equação que relaciona P, T e V, algebricamente, e é cúbica no termo do volume

Pode ser escrita em uma única **forma generalizada** (Abbott, 1979):

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{\Theta(V - \eta)}{(V - b)(V^2 + \delta V + \varepsilon)}$$

Dependendo do modelo, os parâmetros Θ , b , η e ε podem ser constantes, incluindo zero, ou podem ser dependentes de T ou da composição.

Pode ser estendida para sistemas **multicomponentes** utilizando **regras de mistura**

Equações e correlações

*Capacidade calorífica
à pressão constante* \longrightarrow $C_p \equiv a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$

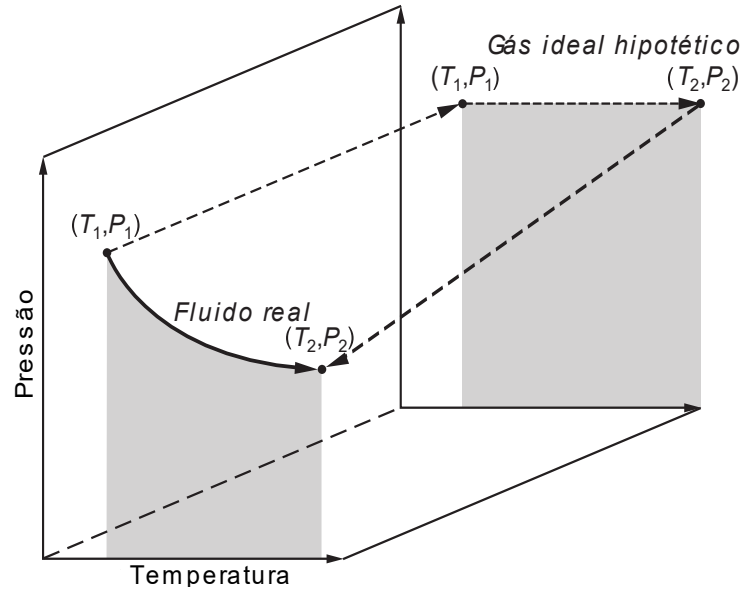
Equação de Antoine \longrightarrow $\log_{10} P_{vp} = A - \frac{B}{T + C}$

Equação de Lee-Kesler \longrightarrow $\ln P_{vpr} = f^{(0)} + \omega f^{(1)}$

Equação de Ambrose-Walton \longrightarrow $\ln P_{vpr} = f^{(0)} + \omega f^{(1)} + \omega^2 f^{(2)}$

Gás real

Figura 1 – Caminho para o cálculo de propriedades termodinâmicas usando funções de partida.



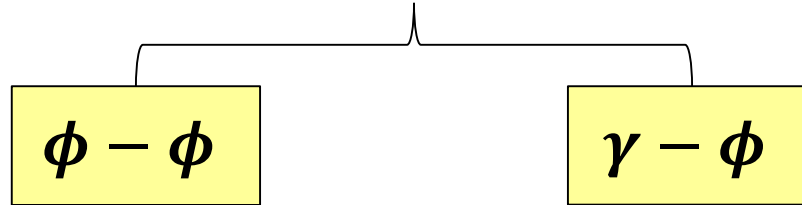
Fonte: Adaptada de (KORETSKY, 2012).

Equilíbrio líquido-vapor

Quando o equilíbrio de fases é atingido, as **fugacidades** para cada substância na fase são iguais

$$\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L$$

Esse tipo de equilíbrio pode ser abordado por dois métodos



$$\hat{\phi}_i^V y_i = \hat{\phi}_i^L x_i$$

$$y_i \Phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat}$$

Em pressões baixas
e moderadas $\longrightarrow \Phi_i = \frac{\hat{\phi}_i^V}{\phi_i^{sat}}$

Programação orientada a objetos

- Fornece abstração da linguagem de programação;
- A solução do problema pode ser descrita utilizando própria linguagem do problema.

Objeto: guarda dados e possui um comportamento próprio, definido pelo programador

Exemplo: Objeto “Automóvel”

Dados: “Quantidade de combustível”, “Velocidade”

Comportamento: “Acelerar”, “Frear”, “Ligar/Desligar”

Conceitos

- **Herança:** um objeto herda comportamento de outro objeto.
Ex.: Um objeto “Carro” herda o comportamento de um objeto “Automóvel”
- **Composição:** um objeto é composto de outros objetos.
Ex.: Um objeto “Oficina” possui vários objetos “Automóvel” (objeto “Carro”, objeto “Moto”, etc.)
- **Polimorfismo:** Uma classe B que é herdeira de uma classe A é considerada um objeto tanto quanto do tipo A quanto do tipo B.
Ex.: Um objeto “Carro” que é herdeiro de um objeto “Automóvel” também é considerado do tipo “Automóvel”.

3

Desenvolvimento

Banco de dados

As estimativas das propriedades termodinâmicas e os cálculos de equilíbrio líquido-vapor exigem o conhecimento de alguns parâmetros fundamentais para substâncias puras

- Parâmetros críticos
- Fator acêntrico
- Parâmetros de equações e correlações

Um banco de dados foi desenvolvido no SQL – Structured Query Language. A base do banco de dados foi gerada a partir dos dados de **468 substâncias** reportados por Poling *et al.* (2001). Informações contidas:

- Parâmetros críticos e fator acêntrico;
- Temperatura de fusão e ebulição;
- Massa molar;
- Constantes da equação da capacidade calorífica e da equação de Antoine.

O banco de dados foi estendido com informações dos grupos principais, subgrupos e parâmetros de interação do modelo UNIFAC. Essas informações foram retiradas dos artigos publicados pelos autores do método.

Implementação computacional



- Linguagem de alto nível;
- Suporta programação orientada a objetos;
- Suporta construção de interfaces gráficas;
- Amplamente utilizada na comunidade de cientistas e engenheiros.

Bibliotecas utilizadas



Design do software

A principal classe do software é a **EOSMixture**. Ela representa um modelo (objeto) de um sistema com um número arbitrário de componentes.

- Os cálculos são realizados utilizando a forma **generalizada** da equação de estado cúbica, utilizando a **regra de mistura clássica com um parâmetro ajustável**.
- Implementa todos os cálculos de propriedades termodinâmicos e de dados de equilíbrio líquido-vapor para **valores arbitrários de pressão, temperatura e das composições das substâncias**.
- A equação de estado cúbica que modela o sistema **pode ser alterada a qualquer instante**, sem complicações externas, devido os conceitos de composição e polimorfismo.

Figura 2 – Classe EOSMixture.

```
71 class EOSMixture:
72     """
73     Main class for modeling a system with multiple substances, using a cubic equation of state.
74
75     This is the main class of the software. It's responsible for calculating all properties,
76     and all the vapor-liquid equilibrium data. It uses a generalized cubic equation of state for all
77     its calculations.
78     """
```

A partir dessa classe, criam-se modelos específicos.
Ex.: sistemas com uma única substância

Equações de estado cúbicas implementadas

O software possui **20 equações de estado cúbicas**, identificadas pelos autores e ano de publicação.

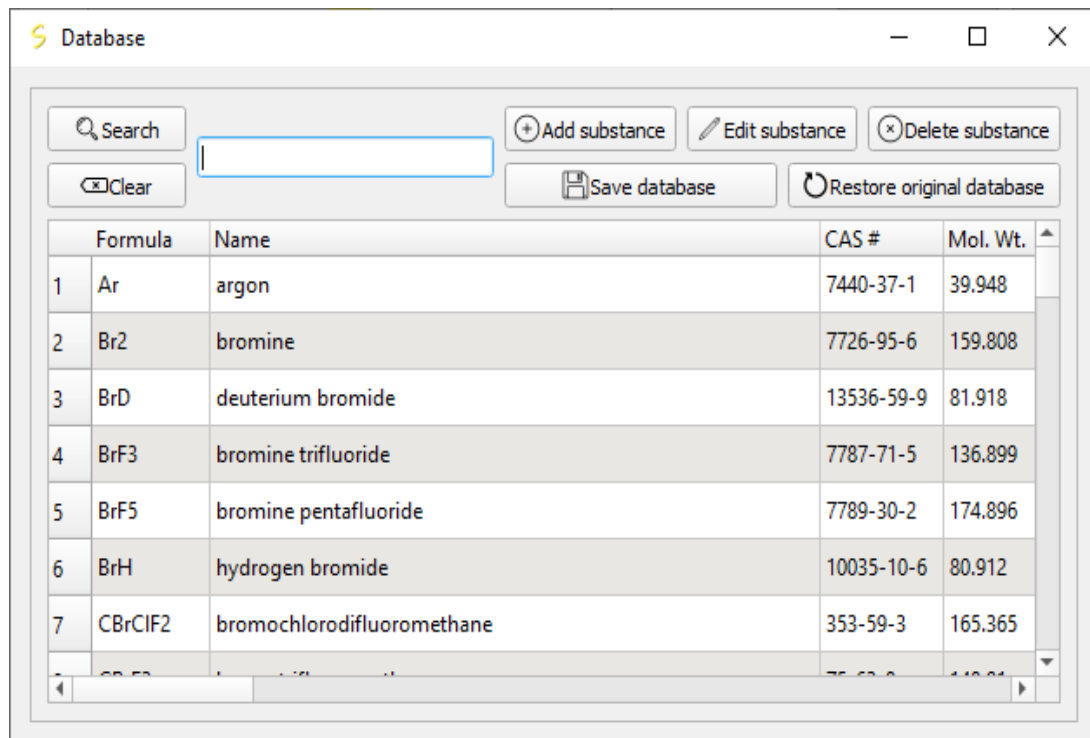
- Van der Waals (1890)
- Redlich e Kwong (1949)
- Wilson (1964)
- Soave (1972)
- Peng e Robinson (1976)
- Schmidt e Wenzel (1980)
- Patel e Teja (1982)
- Pénélox, Rauzy e Fréze (1982)
- Adachi, Lu e Sugie (1983)
- Mathias e Copeman (1983)
- Soave (1984)
- Adachi, Sugie e Lu (1985)
- Stryjek e Vera (1986)
- Twu, Coon e Cunningham (1995)
- Tsai e Chen (1998)
- Ahlers e Gmehling (2001)
- Gasem et al. (2001) – três equações
- Coquelet, Chapoy e Richon (2004)

As equações possuem diferentes características e por isso, dependendo da aplicação, umas são mais adequadas que outras.

Interface gráfica

Interação com o banco de dados

Figura 3 – Janela principal do banco de dados.



Interface gráfica

Interação com o banco de dados

Figura 4 – Formulários de adição/edição de uma substância.

The figure displays three sequential screenshots of a software interface for editing the properties of propanone (acetone). Each window has a title bar that reads "Edit substance - propanone (acetone)" and includes standard window controls (minimize, maximize, close).

First Screenshot (Identification tab): This tab contains fields for "Name" (filled with "propanone (acetone)"), "Formula" (filled with "C3H6O"), and "CAS number" (filled with "67-64-1"). A note below these fields states "(all fields above are required)". There is also an "Aliases" section with a list box containing "1 acetone" and "Add" and "Remove" buttons.

Second Screenshot (General data tab): This tab contains a list of physical properties, each with a numerical input field and a unit label: "Molar weight" (58.08 [g/mol]), "Freezing point temp. (Tfp)" (178.5 [K]), "Boiling temp. (Tb)" (329.22 [K]), "Critical temp. (Tc)" (508.1 [K]), "Critical pressure (Pc)" (47.0 [bar]), "Critical volume (Vc)" (209.0 [cm3/mol]), "Compressibility factor (Zc)" (0.233), and "Acentric factor" (0.307).

Third Screenshot (Cp tab): This tab displays the equation for the heat capacity $\frac{C_p^0}{R} = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$. Below the equation are input fields for the coefficients: a_0 (5.126), a_1 (0.001511), a_2 (5.731e-05), a_3 (-7.177e-08), and a_4 (2.728e-11). There is also a "Temperature range" section with "Tmin [K]" (200.0) and "Tmax [K]" (1000.0).

Each screenshot includes "Confirm" and "Cancel" buttons at the bottom right.

3. Desenvolvimento

Interface gráfica Sistema com uma única substância

Figura 5 – Janela principal para cálculos envolvendo uma substância pura.

Pure Substance Calculations

Search substance

Search: acetone

Formula Name	CAS #	Mol. Wt.
1 C3H6O propanone (acetone)	67-64-1	58.08

Equation of state (20)

- van der Waals (1890)
- Redlich and Kwong (1949)
- Wilson (1964)
- Soave (1972)
- Peng and Robinson (1976)**
- Schmidt and Wenzel (1979)
- Patel and Teja (1982)
- Péneloux, et al. (1982)
- Adachi, et al. (1983)
- Mathias and Copeman (1983)
- Soave (1984)
- Adachi, et al. (1985)

Process variables

T: 360 K P: 1 atm

Reference variables

T: 300 K P: 1 bar

Calculate Units Diagrams Save to txt

Information

Compound: propanone (acetone) (C3H6O)
Equation of state: Peng and Robinson (1976)
Process state: 360.000 K, 1.012 bar
Reference state: 300.000 K, 1.000 bar
State: superheated steam

Results

	Liquid	Vapor
Z	3.117755e-03	0.976898
V [m3/mol]	9.218240e-05	0.028884
Density [kg/m3]	630.055189	2.010812
Vap. P (EOS) [bar]	2.612657	2.612657
Vap. P (Ambrose-Walton) [bar]	2.617497	2.617497
Vap. P (Lee-Kesler) [bar]	2.625229	2.625229
Vap. P (Antoine) [bar]	2.613859	2.613859
H [J/mol]	7689.299969	4853.275019
S [J/molK]	23.320977	14.622444
G [J/mol]	5038.050222	-379.187702
U [J/mol]	7688.371562	4328.888165
A [J/mol]	5037.121815	-903.574556
Fugacity [bar]	2.44848432	0.98943492
Cp [J/molK]	84.865999	84.865999

Log

T out of Antoine range: [247.38, 350.65]

Figura 6 – Alterar unidades dos resultados.

Units

Pressure: bar

Temperature: K

Molar volume: m3/mol

Density: kg/m3

Energy per mol: J/mol

Energ. per mol temp.: J/molK

Ok **Cancel**

3. Desenvolvimento

Interface gráfica Sistemas multicomponentes

Figura 7 – Janelas para estimativa de propriedades.

Mixture properties calculation

System Calculations

Search substance

Search

	Formula	Name	CAS #	Mol. Wt.	Tfp [K]	Tb [K]	Tc [K]
1	Ar	argon	7440-37-1	39.948	83.8	87.27	150.86
2	Br2	bromine	7726-95-6	159.808	265.85	331.9	584.1
3	BrD	deuterium bromide	13536-59-9	81.918	185.69	206.65	362.0
4	BrF3	bromine trifluoride	7787-71-5	136.899	281.92	398.89	600.0
5	BrF5	bromine pentafluoride	7789-30-2	174.896	212.65	314.31	470.0

Selected substances

+ Add - Remove

	Name	Formula	Molar fraction
1	1-hexene	C6H12	0.5
2	ethanol	C2H6O	0.5

Set equimolar system Load system Save system

Vapor-liquid Equilibrium Edit binary interactions parameters

Mixture properties calculation

System Calculations

Equation of state (20)

- van der Waals (1890)
- Redlich and Kwong (1949)
- Wilson (1964)
- Soave (1972)
- Peng and Robinson (1976)
- Schmidt and Wenzel (1979)
- Patel and Teja (1982)
- Péneloux, et al. (1982)
- Adachi, et al. (1983)
- Mathias and Copeman (1983)
- Soave (1984)**
- Adachi, et al. (1985)
- Stryjek and Vera (1986)
- Twu, et al. (1995)
- Tsai and Chen (1998)
- Ahlers-Gmehling (2001)
- Gasem, et al. PR modification (2001)
- Gasem, et al. Twu modification (2001)
- Gasem, et al. (2001)
- Coquelet, et al. (2004)

Information

Mixture:
1-hexene (C6H12) [0.5000]
ethanol (C2H6O) [0.5000]
Equation of state: Soave (1984)
Process state: 333.150 K, 1.000 bar
Reference state: 300.000 K, 1.000 bar
State: compressed or unsaturated liquid

Results

	Liquid	Vapor
Z	5.441246e-03	0.969455
V [m3/mol]	1.507205e-04	0.026854
Density [kg/m3]	432.024854	2.424818
H [J/mol]	5513.147303	3458.293699
S [J/molK]	23.184320	16.690080
G [J/mol]	1278.969921	-2079.496523
U [J/mol]	5512.610324	3161.966429
A [J/mol]	1278.432942	-2375.823793
Fugacity [bar]	0.81997659	0.97038860
Cp [J/molK]	106.938414	106.938414
UG [J/mol]	3408.625348	3408.625348

Process variables

T [333.15 K] P [1 bar]

Reference variables

T [300 K] P [1 bar]

Calculate Units

Save to txt

Log

Vapor-liquid Equilibrium Edit binary interactions parameters

Interface gráfica Sistemas multicomponentes

Figura 8 – Cálculos de equilíbrio líquido-vapor.

Vapor-liquid equilibrium

Equation of state: **Soave (1972)** ☐ UNIFAC

VLE calculations **Binary mixture diagrams**

Calculation type: **Bubble-point Pressure**

T: **333.15** **K**

P: **1** **bar**

Molar fractions

	Name	Formula	Molar fraction
1	1-hexene	C6H12	0.50000
2	ethanol	C2H6O	0.50000

Results

P: **8.43591e-01** [bar]

	Name	Formula	y	Phvap	Phliq	K
1	1-hexene	C6H12	0.62227	0.96786	1.20454	1.24454
2	ethanol	C2H6O	0.37773	0.97965	0.74009	0.75546

Interface gráfica Sistemas multicomponentes

Figura 9 – Interface para construção de diagramas binários e ajuste do parâmetro de interação.

Vapor-liquid equilibrium

Equation of state: Soave (1972) Edit binary interaction parameters UNIFAC

VLE calculations Binary mixture diagrams

Type: isothermal

T 333.15 K

Open exp. data

plot experimental data Fit kij

plot x plot y ☒ plot xy

Plot Save to txt

Results

	P [bar]	x1	y1	K	Phi_liq	Phi_vap
1	4.55757e-01	0.00000	0.00000	8.39487	8.25483	0.98332
2	4.87881e-01	0.01000	0.07409	7.40946	7.27625	0.98202
3	5.16351e-01	0.02000	0.13257	6.62859	6.50183	0.98088
4	5.41660e-01	0.03000	0.17985	5.99488	5.87417	0.97986
5	5.64228e-01	0.04000	0.21883	5.47074	5.35565	0.97896
6	6.02530e-01	0.06000	0.27931	4.65516	4.55013	0.97744
7	6.33574e-01	0.08000	0.32408	4.05099	3.95462	0.97621
8	6.59080e-01	0.10000	0.35867	3.58667	3.49772	0.97520

4

Estudos de caso

Validação dos cálculos

As validações foram feitas modelando um sistema contendo metano puro, utilizando a equação de Peng e Robinson (1976).

Sistema: metano puro à 150 K e 1,0 bar

Propriedade	PRZ	Sindri	Desvio ¹ (%)
Volume molar [m ³ /mol]	1,2280.10 ⁻²	1,2278.10 ⁻²	-0,016
Fator de compressibilidade	0,984	0,984	0,000
Pressão de vapor [bar]	10,480	10,478	-0,019
Estado do fluido	não informa	vapor superaquecido	-

Tabela 1 – Comparação entre propriedades calculadas pelo PRZ e Sindri.

¹Desvio = $\frac{\text{propriedade}_{\text{Sindri}} - \text{propriedade}_{\text{software}}}{\text{propriedade}_{\text{software}}}$

Validação dos cálculos

As validações foram feitas modelando um sistema contendo metano puro, utilizando a equação de Peng e Robinson (1976).

Sistema: metano puro
Estado 1: 120 K e 1,0 bar
Estado 2: 150 K e 1,0 bar

Propriedade	VRTherm	Sindri	Desvio ¹ (%)
ΔH [J/mol]	1002,95	999,57	-0,337
ΔS [J/mol K]	7,46	7,44	-0,321
ΔU [J/mol]	745,75	742,36	-0,455

Tabela 2 – Comparação entre propriedades de estado calculadas pelo VRTherm e Sindri.

Como os cálculos foram implementados de maneira generalizada, a validação serve para todas as equações de estado cúbicas.

¹ $Desvio = \frac{propriedade_{Sindri} - propriedade_{software}}{propriedade_{software}}$

Diagramas de saturação para uma substância pura

Sistema: metano puro

Equação de estado cúbica utilizada: Soave (1972)

Figura 10 – Diagrama P vs V do metano.

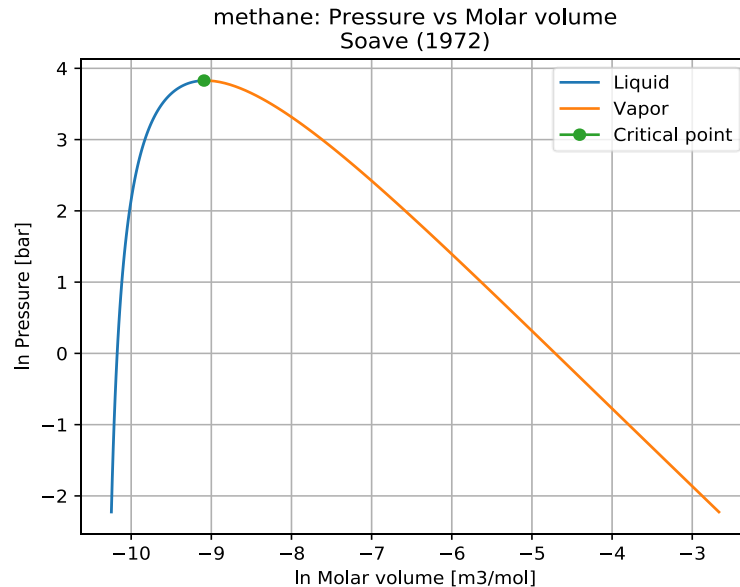
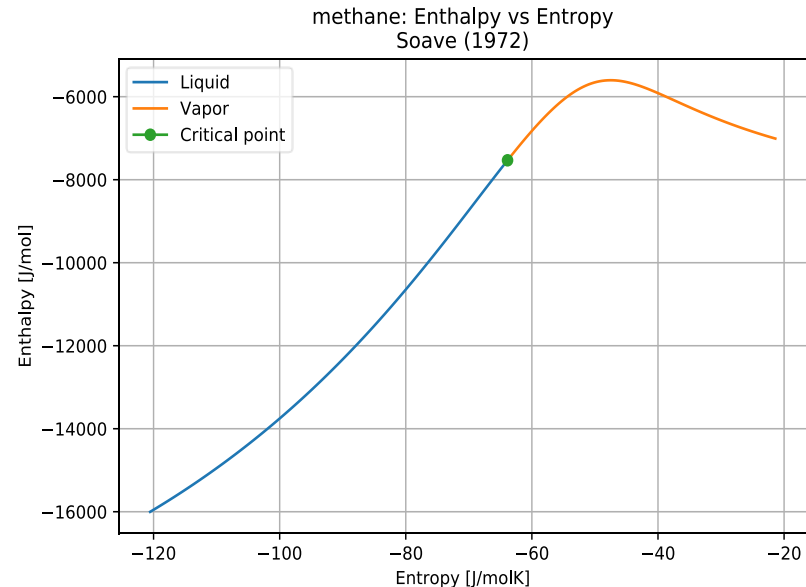


Figura 11 – Diagrama H vs S do metano.



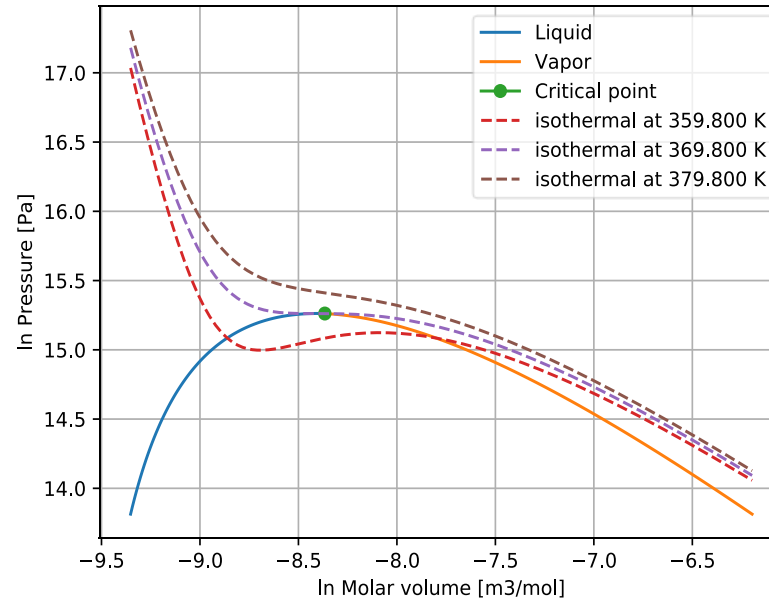
Isotermas nos diagramas de saturação

Sistema: propano puro

Equação de estado cúbica utilizada: Peng e Robinson (1976)

Figura 12 – Isotermas no diagrama de fase,

propane: Pressure vs Molar volume
Peng and Robinson (1976)



Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Sistema: 1-hexano + etanol

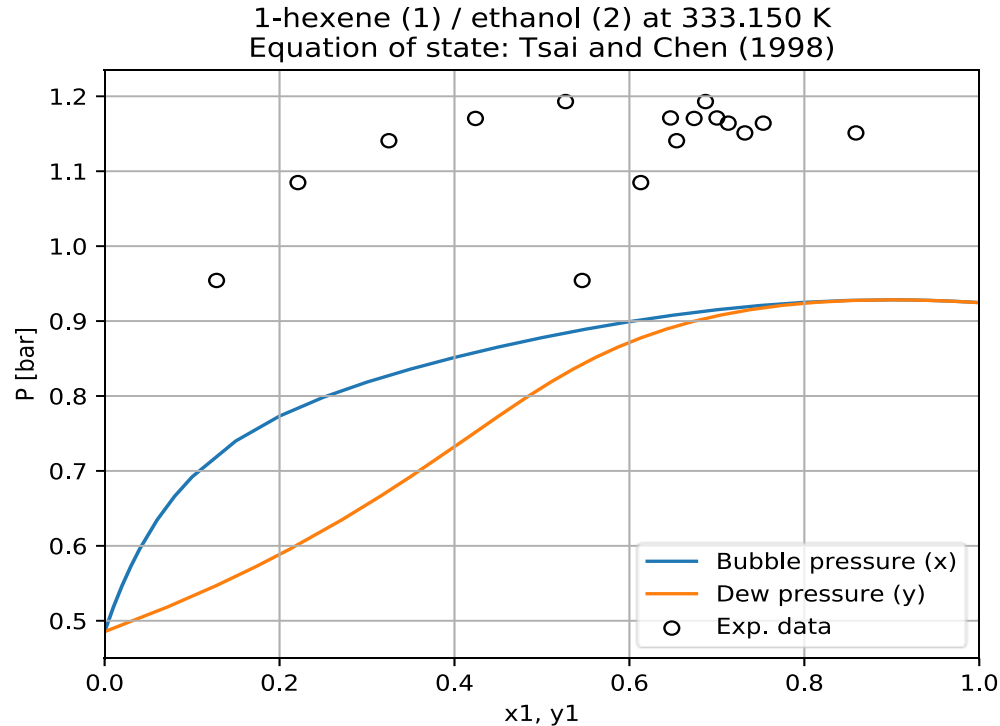
Pressão [kPa]	Fração molar da fase líquida do 1-hexeno	Fração molar da fase vapor do 1-hexeno
95,419	0,128	0,546
108,484	0,221	0,613
114,071	0,325	0,654
117,044	0,424	0,674
119,297	0,527	0,687
117,110	0,647	0,700
116,417	0,753	0,713
115,111	0,859	0,732

Tabela 3 – Dados experimentais do sistema à 333,15 K.

Fonte: Lindberg e Tassios (1971).

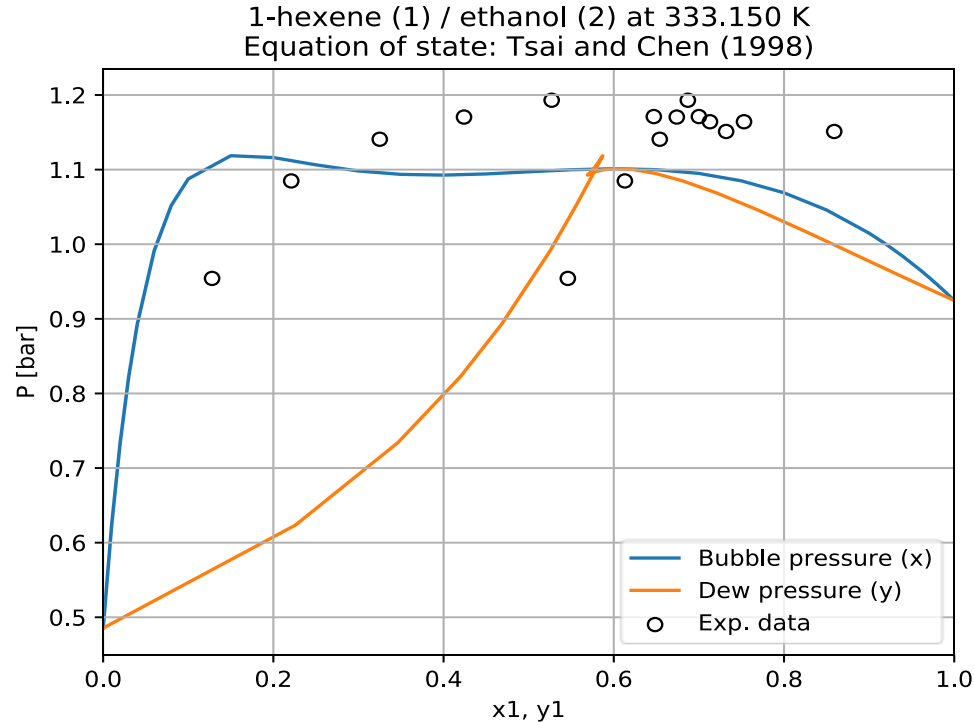
Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Figura 13 – Modelagem do sistema 1-hexeno + etanol utilizando a equação de Tsai e Chen (1998)



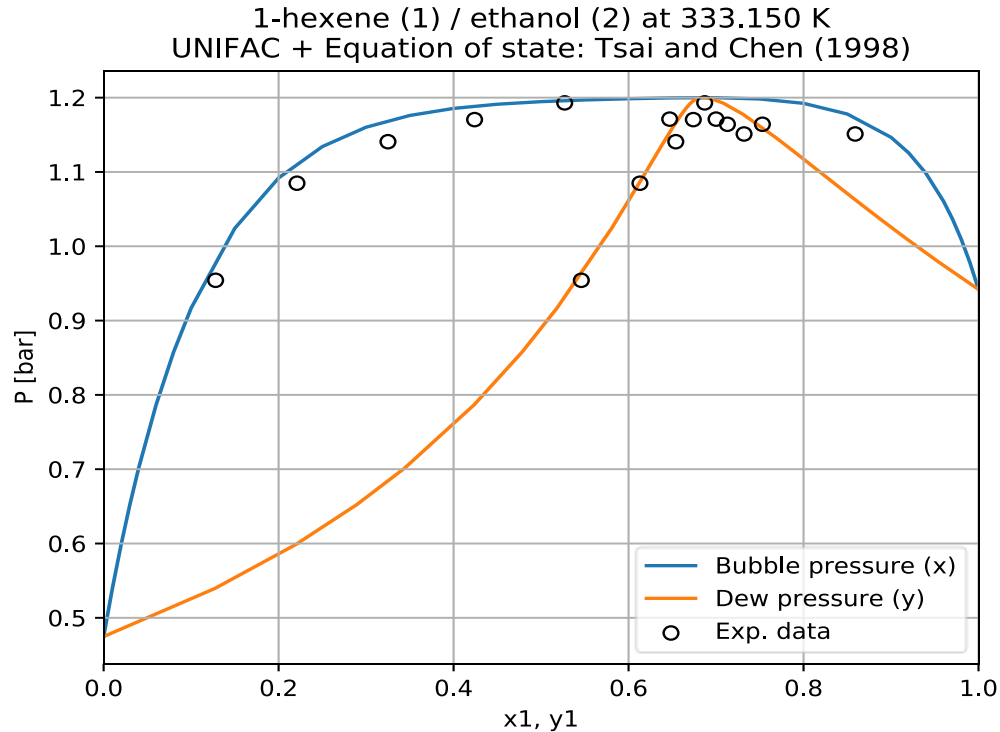
Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Figura 14 – Modelagem do sistema 1-hexeno + etanol utilizando a equação de Tsai e Chen (1998) com $k_{ij} = 0,07286$.



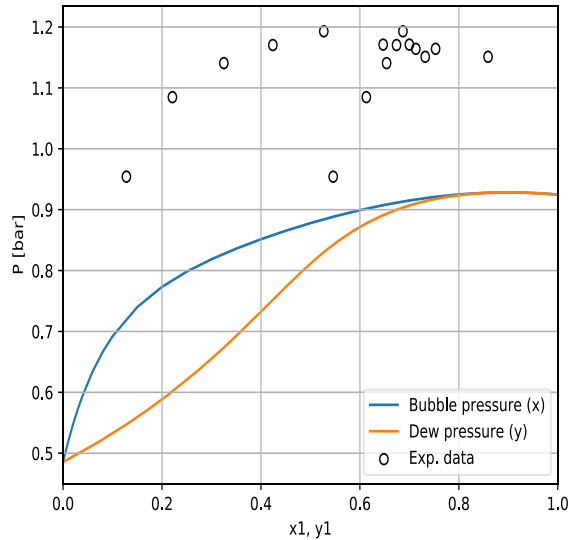
Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Figura 15 – Modelagem do sistema 1-hexeno + etanol utilizando o método UNIFAC + equação de Tsai e Chen (1998)

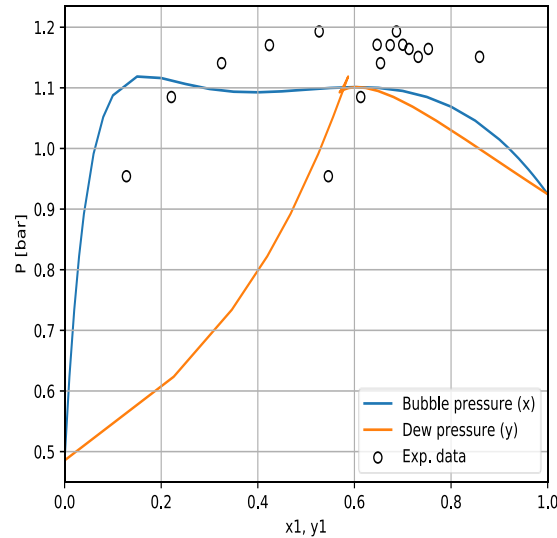


Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

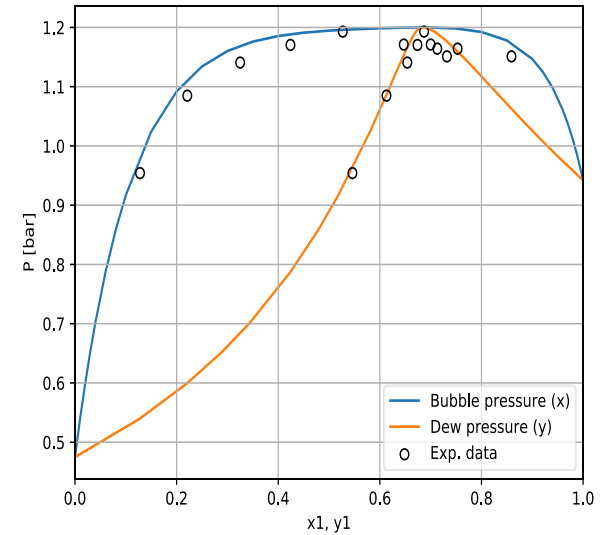
1-hexene (1) / ethanol (2) at 333.150 K
Equation of state: Tsai and Chen (1998)



1-hexene (1) / ethanol (2) at 333.150 K
Equation of state: Tsai and Chen (1998)



1-hexene (1) / ethanol (2) at 333.150 K
UNIFAC + Equation of state: Tsai and Chen (1998)



Cálculos de equilíbrio líquido-vapor

Sistema: pentano, hexano e ciclohexano a 390,0 K e 5,0 bar

Componente	Sindri		VRTherm		x - desvio (%)	y - desvio (%)
	x	y	x	y		
pentano	0,32865	0,52695	0,32856	0,52735	0,029	-0,075
hexano	0,36863	0,28921	0,36802	0,28915	0,166	0,021
ciclohexano	0,30272	0,18384	0,30343	0,18350	-0,232	0,184

Tabela 4 – Modelado pela abordagem ϕ - ϕ , utilizando a equação de estado cúbica de Soave (1972).

5

Conclusões

5. Conclusões

Neste trabalho, foi desenvolvido um software computacional denominado *Sindri*.

- Possui uma interface gráfica amigável e intuitiva, tendo sido desenvolvido para estudantes, pesquisadores e profissionais de áreas correlatas à engenharia química;
- Possibilita ao usuário estimar propriedades termodinâmicas e dados de equilíbrio líquido-vapor por meio de 20 equações de estado cúbicas encontradas na literatura, utilizando a abordagem φ - φ ;
- Possui o método de contribuição de grupos UNIFAC, capaz de estimar o coeficiente de atividade da fase líquida, possibilitando a abordagem $\gamma - \phi$ para cálculos de equilíbrio de fases de sistemas mais complexos;
- A interface gráfica se mostrou eficiente, permitindo que o usuário altere, a qualquer momento, a equação de estado cúbica que rege o comportamento do sistema analisado.

5. Conclusões

Figura 16 – Website do Sindri.



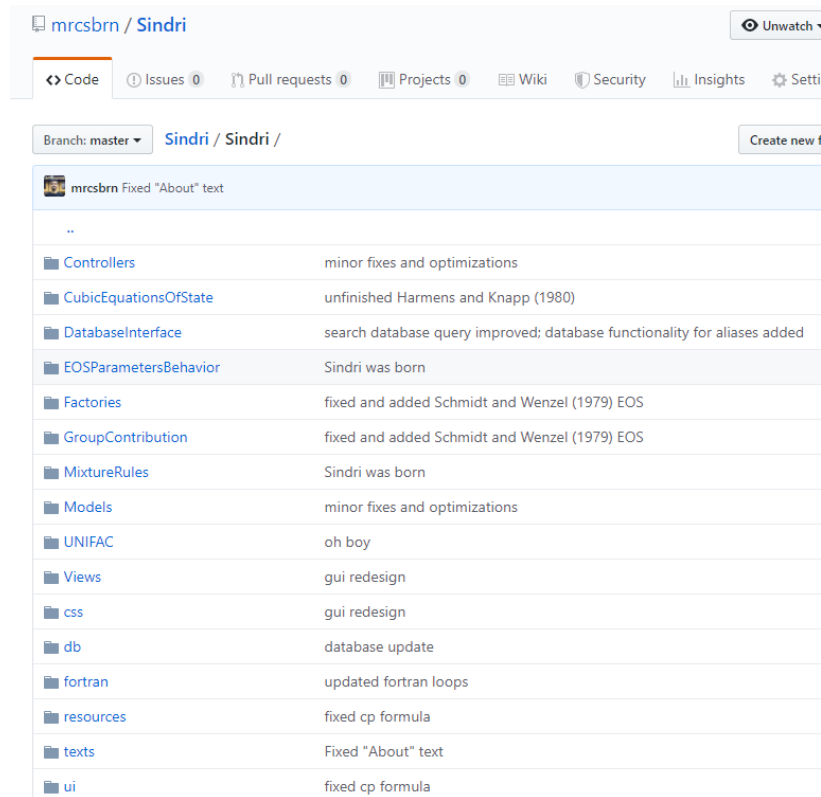
Description

Sindri is a software developed to estimate thermodynamics properties and vapor-liquid equilibrium calculations using cubic equations of state.

This software was developed as part of an undergraduate thesis to obtain a bachelor degree in Chemical Engineering at the Federal University of Lavras, Brazil.

mracsbrn.github.io/Sindri

Figura 17 – Repositório virtual.



github.com/mracsbrn/Sindri

Congressos



SINDRI: UMA NOVA FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA CÁLCULOS DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR A PARTIR DE EQUAÇÕES DE ESTADO CÚBICAS

M. B. F. SILVA¹ e N. S. EVANGELISTA¹

¹ Universidade Federal de Lavras, Departamento de Engenharia
E-mail para contato: marcusbfs@gmail.com



UMA NOVA FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA A ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E CÁLCULOS DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR A PARTIR DE EQUAÇÕES DE ESTADO CÚBICAS

Marcus B. F. Silva*, Nathan S. Evangelista
Departamento de Engenharia, Universidade Federal de Lavras, Lavras, Minas Gerais, Brasil
*Autor para correspondência: marcusbfs@gmail.com

Referências

- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. **The properties of gases and liquids**. 5. ed. New York: Mcgraw-hill, 2001.
- SANDLER, S. I. **Chemical and Engineering Thermodynamics**. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.
- ELLIOTT, J. R.; LIRA, C. T. **Introductory Chemical Engineering Thermodynamics**. 1. ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1999.
- KORETSKY, M. D. **Termodinâmica para Engenharia Química**. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.
- VRTECH. **VRTherm Thermodynamic Package**, 2004. Disponível em: <<http://www.iise.ltd/pt/vrtherm>>
- CASTIER, M.; AMER, M. M. An evolving tool for teaching chemical engineering thermodynamics. **Education for Chemical Engineers**, v. 6, n. 2, p. 62–70, 2011.
- EVANGELISTA, N. S.; DO CARMO, F. R.; DE SANT'ANA, H. B. **OCTOPUS: uma nova ferramenta computacional para estimativa de propriedades físicas e químicas de compostos orgânicos moleculares**. XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química. Anais.Fortaleza, Ceará: 2016.
- ABBOTT, M. M. Cubic Equations of State: An Interpretive Review. **THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY**, v. 176, p. 24, 1979.
- KORETSKY, M. D. **Engineering and Chemical Thermodynamics**. Wiley, 2012.
- VAN DER WAALS, J. D. Molekulartheorie eines Körpers, der aus zwei verschiedenen Stoffen besteht. **Zeitschrift für Physikalische Chemie**, v. 5, n. 1, p. 133–173, 1890.
- REDLICH, O.; KWONG, J. N. S. On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Fugacities of gaseous solutions. **Chemical Reviews**, 1949.
- WILSON, G. M. Vapor-Liquid Equilibria, Correlation by Means of a Modified Redlich-Kwong Equation of State. **Advances in Cryogenic Engineering**, 1964.
- SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. **Chemical Engineering Science**, 1972.
- PENG, D. Y.; ROBINSON, D. B. A New Two-Constant Equation of State. **Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals**, 1976.
- SCHMIDT, G.; WENZEL, H. A modified van der Waals type equation of state. **Chemical Engineering Science**, 1980.
- PATEL, N. C.; TEJA, A. S. A new cubic equation of state for fluids and fluid mixtures. **Chemical Engineering Science**, 1982.

Referências

- PÉNELOUX, A.; RAUZY, E.; FRÉZE, R. A consistent correction for Redlich–Kwong–Soave volumes. **Fluid Phase Equilibria**, 1982.
- ADACHI, Y.; LU, B. C. Y.; SUGIE, H. A four-parameter equation of state. **Fluid Phase Equilibria**, 1983.
- MATHIAS, P. M.; COPEMAN, T. W. Extension of the Peng–Robinson equation of state to complex mixtures: Evaluation of the various forms of the local composition concept. **Fluid Phase Equilibria**, 1983.
- SOAVE, G. Improvement of the Van Der Waals equation of state. **Chemical Engineering Science**, 1984.
- ADACHI, Y.; SUGIE, H.; LU, B. C. Y. Development of van der waals type of equation of state. **JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN**, 1985.
- STRYJEK, R.; VERA, J. H. PRSV: An improved peng–Robinson equation of state for pure compounds and mixtures. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, 1986.
- TWU, C. H.; COON, J. E.; CUNNINGHAM, J. R. A new generalized alpha function for a cubic equation of state Part 1. Peng–Robinson equation. **Fluid Phase Equilibria**, 1995.
- TSAI, J.-C.; CHEN, Y.-P. Application of a volume–translated Peng–Robinson equation of state on vapor–liquid equilibrium calculations. **Fluid Phase Equilibria**, v. 145, n. 2, p. 193–215, 1998.
- AHLERS, J.; GMEHLING, J. Development of an universal group contribution equation of state I. Prediction of liquid densities for pure compounds with a volume translated Peng–Robinson equation of state. **Fluid Phase Equilibria**, 2001.
- GASEM, K. A. M. et al. A modified temperature dependence for the Peng–Robinson equation of state. **Fluid Phase Equilibria**, 2001.
- COQUELET, C.; CHAPOY, A.; RICHON, D. Development of a new alpha function for the Peng–Robinson equation of state: Comparative study of alpha function models for pure gases (natural gas components) and water–gas systems. **International Journal of Thermophysics**, 2004.
- LINDBERG, G. W.; TASSIOS, D. Effect of Organic and Inorganic Salts on Relative Volatility of Nonaqueous Systems. **Journal of Chemical and Engineering Data**, 1971.



Obrigado!

 marcusbfs@gmail.com

 github.com/mrcsbrn