



Latin American Journal of Energy Research – Lajer (2025) v. 12, n. 3, p. 64–72  
<https://doi.org/10.21712/lajer.2025.v12.n3.p64-72>

**1º Encontro Interdisciplinar em Energia, Programa de Pós-graduação em Energia, Ufes**



**Avaliação comparativa da equação de Peng-Robinson e de suas variantes Mathias-Copeman e Stryjek-Vera, para metano puro em regime subcrítico**  
*Comparative evaluation of the Peng-Robinson equation of state and its Mathias-Copeman and Stryjek-Vera variants for pure methane in the subcritical regime*

Wilson José Feroni<sup>1,2,\*</sup>, Rita de Cassia Feroni<sup>3</sup>, Oldrich Joel Romero<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Aluno do Programa de Pós-Graduação de Doutorado em Energia, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus São Mateus, ES, Brasil

<sup>2</sup> Professor EBTT do Instituto Federal de Educação do Espírito Santo – Ifes, campus Colatina, ES, Brasil

<sup>3</sup> Professora do Departamento de Engenharia de Produção da Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus Goiabeiras, Vitória, ES, Brasil

<sup>4</sup> Professor do Programa de Pós-graduação em Energia da Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus São Mateus, ES, Brasil

\*Autor para correspondência, E-mail: wilson@ifes.edu.br

**Resumo:** No presente estudo é avaliada a equação de estado de Peng-Robinson (PR) e suas variações com funções de correção de Mathias-Copeman (MC) e de Stryjek-Vera (SV) para o metano puro, adotando como referência as equações auxiliares de Setzmann-Wagner. As equações de estado foram implementadas em Python para o cálculo da pressão de saturação ( $P^{sat}(T)$ ), da densidade do líquido saturado ( $\rho_l$ ) e da densidade do vapor saturado ( $\rho_v$ ). Os resultados demonstram, em uma análise visual, que as curvas de  $P^{sat}(T)$  mostram boa coincidência com a referência, sendo as diferenças observadas a partir do cálculo dos erros, onde MC apresenta a melhor aderência, PR mantém desvio baixo e estável, e SV concentra as maiores discrepâncias. Para  $\rho_l$ , observa-se superestimação em baixas temperaturas, que diminui com o aumento de  $T$ ; no topo da faixa, PR e MC tendem a leve subestimação enquanto SV apresenta subestimação mais acentuada. Para  $\rho_v$ , os modelos PR e MC permanecem próximas da referência na maior parte do intervalo, enquanto SV transita de forte subestimação no início, para superestimação nas temperaturas mais altas. Conclui-se que, no regime subcrítico analisado, a variante MC mostra melhor acurácia para  $P^{sat}$  e densidades, a PR padrão apresenta desempenho semelhante e a SV tende a maiores desvios.

**Palavras-chave:** Peng-Robinson; Mathias-Copeman; Stryjek-Vera; Metano; Pressão de Saturação.

**Abstract:** The study reviews the Peng-Robinson equation of state and its temperature-correction variants Mathias-Copeman and Stryjek-Vera for pure methane, using the Setzmann-Wagner ancillary equations as the reference dataset. The equations of state were implemented in Python to compute saturation pressure  $P^{sat}$ , saturated liquid density  $\rho_l$ , and saturated vapor density  $\rho_v$ . Results show that the  $P^{sat}(T)$  curves from all formulations nearly coincide with the reference, with differences emerging in the error metrics: MC provides the closest agreement, PR maintains a low and stable deviation, and SV exhibits the largest discrepancies. For  $\rho_l$ , all models overpredict at low temperatures and the error decreases as  $T$  increases; near the upper end of the range, PR and MC tend to a slight underprediction, while SV shows a more pronounced underprediction. For  $\rho_v$ , PR and MC remain close to the reference across most of the interval, whereas SV transitions from strong underprediction at the cold end to overprediction at the warm end. Overall, within the analyzed subcritical range, the MC variant offers the best trade-off with accuracy for  $P^{sat}$  and densities; standard PR performs similarly but slightly worse; and SV tends to larger deviations.

**Keywords:** Peng-Robinson; Mathias-Copeman; Stryjek-Vera; Methane; Saturation pressure.

## 1 Introdução

A formulação de equações de estado cúbicas constitui um elemento fundamental na modelagem termodinâmica de fluidos puros e misturas complexas. Nesse contexto, a equação de estado de Peng e Robinson (PR), proposta em 1976 no âmbito de um projeto da *Natural Gas Processors Association* conduzido na *University of Alberta* entre 1974 e 1975, destaca-se por sua simplicidade de formulação e pelo bom desempenho preditivo na estimativa de propriedades em equilíbrio vapor-líquido (Peng e Robinson, 1976). Seu objetivo original foi superar as limitações do modelo Soave-Redlich-Kwong (SRK), publicada em 1972, sobretudo na previsão de densidades de líquidos e na descrição do comportamento próximo ao ponto crítico em sistemas contendo hidrocarbonetos pesados, preservando a estrutura cúbica e introduzindo melhorias na representação do termo atrativo (Peng e Robinson, 1976).

Em particular, a relação PR adota um fator de compressibilidade crítico  $Z_c \approx 0,307$ , que é mais realista do que o valor  $Z_c = 1/3$  adotado por SRK, além de acrescentar o termo  $b(v - b)$  no denominador do termo atrativo, melhorando a representação das forças de atração e, por consequência, as previsões de densidades líquidas (Peng e Robinson, 1976; Echeverry et al., 2017). A equação de Peng-Robinson (PR) com a função de correção de temperatura do tipo Soave,  $\alpha(T)$ , é representada pela Eq. 1 (Peng e Robinson, 1976).

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{\alpha\alpha(T)}{v(v+b)+b(v-b)}, \quad (1)$$

em que  $P$ : a pressão absoluta do sistema,  $T$ : temperatura absoluta,  $R$ : constante universal dos gases,  $v$ : volume molar,  $\alpha$ : parâmetro atrativo básico da PR definido por:  $\alpha = 0,45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$ ,  $b$ : parâmetro de co-volume de Van der Waals, definido por:  $b = 0,07780 \frac{R T_c}{P_c}$ ,  $T_c$  e  $P_c$ : temperatura e pressão críticas da substância, respectivamente,  $\alpha(T)$  é o parâmetro de correção de temperatura proposto por Soave (1972) e representado pela Eq. 2.

$$\alpha(T) = [1 + k(1 - \sqrt{T_r})]^2, \quad (2)$$

onde  $T_r$  é a temperatura reduzida, definida por  $T_r = \frac{T}{T_c}$ , e  $k$  é a constante característica de cada substância, dada pela Eq. (2b).

$$k = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2, \quad (2b)$$

sendo  $\omega$  o fator acêntrico que depende da substância analisada.

A Eq. 1 pode ser reescrita na forma de uma equação cúbica, como mostrado na Eq. (3).

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0, \quad (3)$$

onde  $Z$  é o fator de compressibilidade do fluido definido por  $Z = \frac{Pv}{RT}$ ,  $A = \frac{\alpha\alpha(T)P}{R^2 T^2}$  e  $B = \frac{bP}{RT}$ .

De acordo com Peng e Robinson (1976), a Eq. 3 admite uma ou três raízes reais, a depender do número de fases. Na região bifásica, a maior raiz corresponde ao fator de compressibilidade do vapor e a menor ao do líquido; a raiz intermediária não representa um estado estável.

Peng e Robinson aplicaram seu modelo à previsão de condensação retrógrada em dutos de gás natural, obtendo desempenho superior à SRK na estimativa de pontos de orvalho e frações líquidas em condições típicas de gasodutos (Peng e Robinson, 1976; Echeverry et al., 2017). Segundo os autores, estudos subsequentes confirmaram a capacidade de descrever o comportamento retrógrado em misturas gás-condensado próximas ao ponto crítico. Desde então, a relação de PR consolidou-se como uma das equações cúbicas de dois parâmetros mais utilizadas para cálculos de equilíbrio vapor-líquido, propriedades volumétricas e propriedades termodinâmicas de substâncias puras e misturas. Além disso, mais de 200 modificações já foram publicadas, com ênfase na melhoria da representação de pressões de vapor, calor de vaporização, densidade de líquidos e consistência termodinâmica em regiões críticas e quase críticas, com forte penetração na indústria petroquímica (Echeverry et al., 2017). A Figura 1 apresenta as modificações

realizadas na equação PR no período de 1975 a 2019 em intervalos de cinco anos. Em média são 30 modificações no intervalo, implicando, em aproximadamente, 6 alterações por ano. Um esforço bastante relevante o qual demonstra a importância do modelo PR.

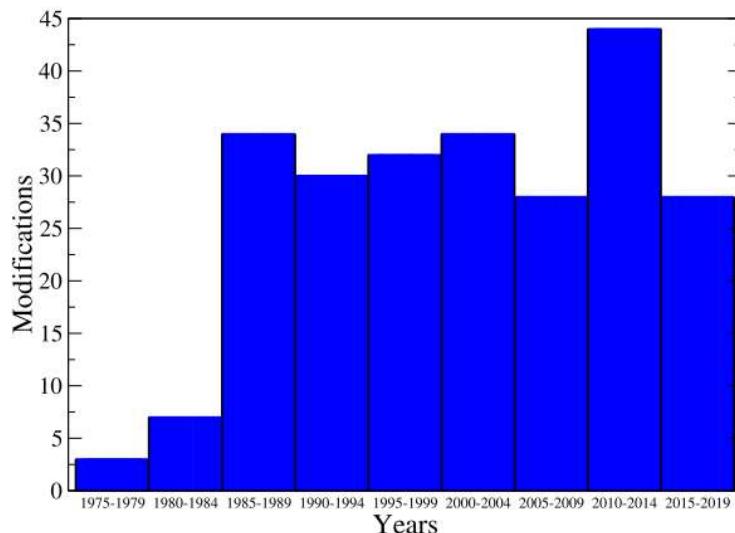


Figura 1. Modificações publicadas do PR EoS desde 1976 até 2017 para compostos puros. Fonte: Echeverry et al. (2017).

O objetivo deste trabalho é apresentar uma análise comparativa entre a pressão de saturação  $P^{sat}$ , a densidade do líquido  $\rho_l$  e a densidade do vapor  $\rho_v$ , para temperaturas ( $T$ ) menores que a temperatura crítica ( $T_c$ ) do composto metano a partir de diferentes formulações encontradas na literatura. Como dados de referência, utilizam-se os valores calculados a partir das equações auxiliares de Wagner, propostas por Setzmann e Wagner (1991), que são confrontados com os resultados obtidos pela equação de estado de Peng-Robinson (PR) e suas variações com as funções de correção de Mathias-Copeman (MC) e de Stryjek-Vera (SV). A escolha das modificações de Mathias-Copeman (MC) e de Stryjek-Vera (SV) para a comparação no presente estudo, baseou-se na análise aprofundada dessas variantes realizada por Echeverry et al. (2017).

## 2 Metodologia

O trabalho de Echeverry et al. (2017) além de listar mais de 200 modificações da equação de estado de Peng-Robinson (Figura 1), também analisou detalhadamente as mudanças feitas por Mathias e Copeman (1983) e Stryjek e Vera (1986a).

A mudança proposta por Mathias e Copeman (1983) no parâmetro de correção de temperatura de Soave, Eq. 2, é apresentada pela Eq. 4.

$$\alpha(T) = \left[ 1 + c_1(1 - \sqrt{T_r}) + c_2(1 - \sqrt{T_r})^2 + c_3(1 - \sqrt{T_r})^3 \right]^2, \quad (4)$$

onde  $c_1 = 0,416$ ,  $c_2 = -0,173$  e  $c_3 = 0,348$ , são parâmetros ajustáveis específicos de cada composto, nesse caso o metano, determinados a partir de dados experimentais de equilíbrio vapor-líquido, conforme a literatura (Coquelet et al., 2004).

Já a mudança proposta por Stryjek e Vera (1986a, 1986b, 1986c) é direcionada ao parâmetro  $k$ , Eq. 2b, apresentada pela Eq. 5,

$$\alpha(T) = k_0 + [k_1 + k_2(k_3 + \sqrt{T_r})](1 + \sqrt{T_r})(0,7 - T_r), \quad (5)$$

onde  $k_0 = 0,378893 + 1,4897153\omega - 0,17131848\omega^2 + 0,0196553\omega^3$ . De acordo com os autores, para o metano, gás considerado no estudo,  $k_1 = -0,00159$ ,  $k_2 = 0,1521$ ,  $k_3 = 0,517$  e  $\omega = 0,011$ .

Os dados de referência da pressão de saturação  $P^{sat}$  e das densidades de líquido saturado  $\rho_l$  e de vapor saturado  $\rho_v$  do metano, foram determinados pelas equações auxiliares de Wagner propostas por Setzmann e Wagner (1991), associadas à equação de estado de referência explícita na energia de Helmholtz para o

metano. As equações auxiliares de Wagner para pressão de saturação ( $P^{sat}$ ), densidade do líquido saturado ( $\rho_l$ ) e densidade de vapor saturado ( $\rho_v$ ) são, respectivamente, as Eqs. 6, 7 e 8.

$$\ln\left(\frac{P^{sat}}{p_c}\right) = \frac{T_c}{T} \left[ n_1\theta + n_2\theta^{\frac{3}{2}} + n_3\theta^2 + n_4\theta^{\frac{9}{2}} \right], \quad (6)$$

sendo  $n_1 = -6,036219$ ,  $n_2 = 1,409353$ ,  $n_3 = -0,4945199$ ,  $n_4 = -1,443048$ .

$$\ln\left(\frac{\rho_l}{\rho_c}\right) = n_1\theta^{0,354} + n_2\theta^{\frac{1}{2}} + n_3\theta^{\frac{5}{2}}, \quad (7)$$

sendo  $n_1 = 1,990639$ ,  $n_2 = -0,78756197$ ,  $n_3 = 0,036976723$ .

$$\ln\left(\frac{\rho_v}{\rho_c}\right) = n_1\theta^{0,354} + n_2\theta^{\frac{5}{6}} + n_3\theta^{\frac{3}{2}} + n_4\theta^{\frac{5}{2}} + n_5\theta^{\frac{25}{6}} + n_6\theta^{\frac{47}{6}}, \quad (8)$$

sendo  $n_1 = -1,8802840$ ,  $n_2 = -2,8526531$ ,  $n_3 = -3,0006480$ ,  $n_4 = -5,2511690$ ,  $n_5 = -13,191859$ ,  $n_6 = -37,553961$ .

Nas equações apresentadas tem-se que  $T$  é a temperatura,  $T_c = 190,564\text{ K}$  é a temperatura crítica,  $p_c = 4,5992\text{ MPa}$  e  $\rho_c = 162,66\text{ kgm}^{-3}$ , são a pressão e a densidade críticas e  $\theta = 1 - \frac{T}{T_c}$ .

Para avaliar a qualidade relativa de ajuste da  $P^{sat}$ ,  $\rho_l$  e  $\rho_v$  em cada ponto, foram usadas as Eqs. 9 e 10 para calcular o erro relativo percentual dos modelos em relação aos dados experimentais obtidos pelas equações Wagner.

$$\varepsilon_{x,i}(\%) = 100 \frac{x_{c,i} - x_{exp,i}}{x_{exp,i}}, \quad (9)$$

$$AARD\% = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_{c,i} - x_{exp,i}}{x_{exp,i}} \right|, \quad (10)$$

onde  $\varepsilon_{x,i}$  é o erro relativo percentual,  $AARD\%$  é o desvio absoluto relativo médio,  $x_{c,i}$  é o valor calculado,  $x_{exp,i}$  é o valor experimental e  $n$  é a quantidade de elementos da amostra. Como referência, as Eqs. 9 e 10 foram usadas nos estudos de Turnaoglu e Shiflett (2019) e Sharifzadegan et al. (2023).

A pressão de saturação  $P^{sat}(T)$  foi determinada, em cada temperatura subcrítica  $T$ , utilizando a equação de estado de Peng-Robinson (PR) e suas variantes de Mathias-Copeman (MC) e Stryjek-Vera (SV). O cálculo baseou-se na condição de equilíbrio líquido-vapor,  $f_l = f_v$ , em que a fugacidade de cada fase é expressa por  $f = \varphi P$ , onde  $P$  é a pressão absoluta do sistema e  $\varphi$  o coeficiente de fugacidade. Dessa forma, a igualdade das fugacidades é equivalente à condição  $\ln\varphi_l = \ln\varphi_v$ . O coeficiente de fugacidade  $\varphi$  foi obtido pela Eq. 11, conforme Peng e Robinson (1976).

$$\ln\varphi(Z, A, B) = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \ln\left(\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z + (1 - \sqrt{2})B}\right), \quad (11)$$

As densidades foram avaliadas exatamente nessa condição de coexistência. Nas mesmas condições de  $T$  e  $P^{sat}(T)$ , obtiveram-se as raízes  $Z_l$  e  $Z_v$  da equação cúbica em  $Z$ ; calcularam-se os volumes molares  $V = \frac{ZRT}{P}$  e, por fim, as densidades  $\rho_l = \frac{M}{V_l}$  e  $\rho_v = \frac{M}{V_v}$  nas fases líquida e vapor respectivamente, em que  $M$  é a massa molar do componente.

As equações para os cálculos do  $P^{sat}$  (Eq. 6),  $\rho_l$  (Eq. 7), e  $\rho_v$  (Eq. 8) foram implementadas na linguagem de programação Python. Os dados utilizados para o metano foram obtidos em NIST (2025). Uma parte do código é apresentada na Figura 2 e os resultados são destacados na próxima seção.

```

import numpy as np          # importa NumPy (vetores, operações numéricas)
import matplotlib.pyplot as plt # importa Matplotlib (gráficos)
from scipy.optimize import brentq # importa Brent (raiz em intervalo com troca de sinal)

R = 8.314462618           # define a constante universal dos gases (J/mol/K)

# ----- 1) Utilidades da PR (1 componente) -----
def Z_roots_PR(A, B):
    c2 = -(1.0 - B)          # função: calcula raízes reais Z da cúbica da PR
    c1 = (A - 3.0*B**2 - 2.0*B) # coeficiente de Z^2 na cúbica padrão da PR
    c0 = -(A*B - B**2 - B**3) # coeficiente de Z
    c0 = -(A*B - B**2 - B**3) # termo independente
    r = np.roots([1.0, c2, c1, c0]) # resolve a cúbica e retorna três raízes (complexas/ reais)
    r = np.real(r[np.isreal(r)]) # filtra e mantém somente as raízes reais
    r.sort() # ordena (menor ≈ líquido; maior ≈ vapor)
    return r # devolve array de raízes reais

def ln_phi_PR(Z, A, B):
    rt2 = np.sqrt(2.0) # função: ln(phi) fechado da PR para 1 componente
    if Z <= B: # calcula V2 (constante usada na expressão)
        return np.nan # verifica domínio do log(Z - B)
    term1 = Z - 1.0 - np.log(Z - B) # se inválido, retorna NaN
    num = Z + (1.0 + rt2)*B # primeira parcela (termos volumétricos)
    den = Z + (1.0 - rt2)*B # numerador do log do termo atrativo
    if num <= 0 or den <= 0: # denominador do log do termo atrativo
        # checa positividade dos argumentos do log

```

Figura 2. Parte do código em Python implementando a EoS para o metano.

### 3 Resultados e discussões

A análise da pressão de saturação constitui etapa fundamental na avaliação do desempenho de equações de estado, pois esse parâmetro está diretamente associado ao equilíbrio líquido-vapor e funciona como verificação de consistência termodinâmica dos modelos. No caso do metano, cuja base experimental é bem estabelecida pelas equações auxiliares de Wagner, confrontam-se formulações da equação de Peng–Robinson (PR), com as variações propostas por Mathias-Copeman (MC) e Stryjek-Vera (SV), com o objetivo de avaliar sua capacidade preditiva ao longo de ampla faixa de temperaturas, comparando-as aos dados de referência obtidos pelas equações auxiliares de Wagner. A Figura 3 apresenta as curvas de pressão de saturação obtidas a partir dos modelos e da referência experimental.

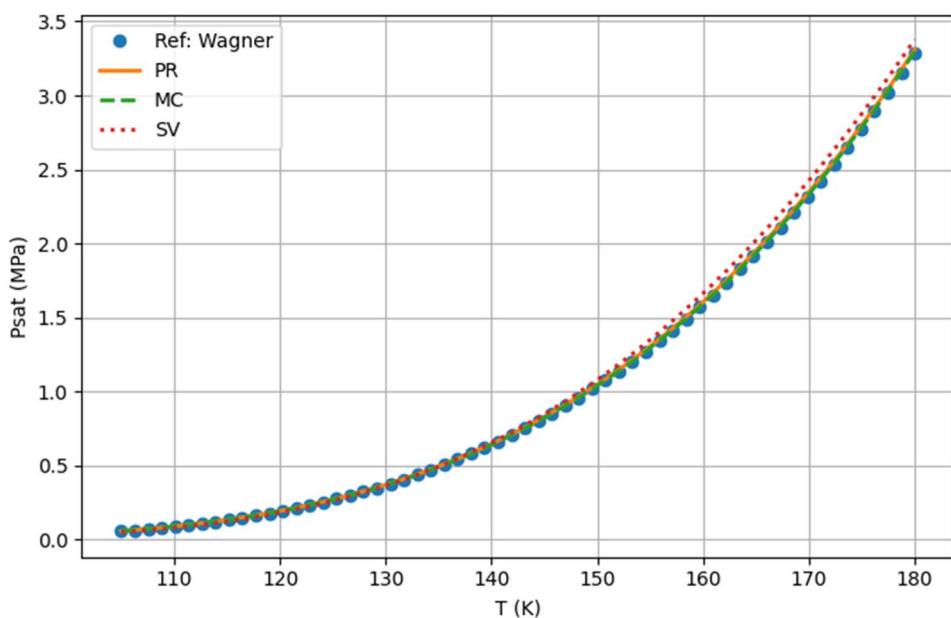


Figura 3. Comparação da pressão de saturação entre os dados de referência de Wagner e os modelos PR, MC e SV.

Observa-se que as curvas de pressão de saturação previstas pelos três modelos ficam muito próximas dos dados de referência, dificultando a distinção visual entre os desvios. Para tornar mais clara essa comparação, a Figura 4 apresenta os erros relativos (Eq. 9) em função da temperatura, evidenciando melhor as diferenças de desempenho entre as equações de estado avaliadas.

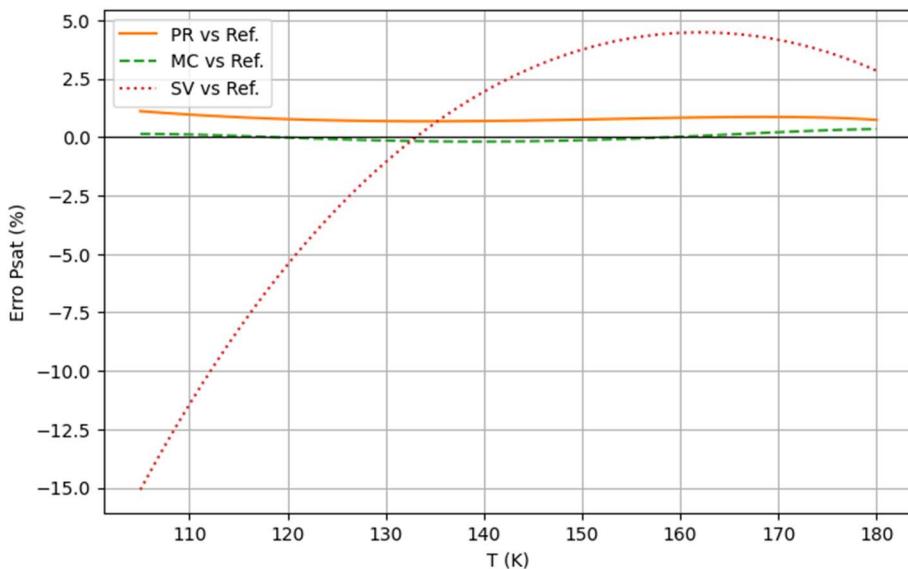


Figura 4. Comparação dos erros de pressão de saturação do metano: Wagner, PR, MC e SV.

A análise dos erros relativos mostra que o modelo PR se mantém estável, com desvios sempre próximos de 1% em toda a faixa de temperatura. A modificação MC apresenta o melhor desempenho, com pequenas variações em torno de zero, indicando boa concordância com os dados de referência. Já o SV exibe as maiores discrepâncias.

A Figura 5 apresenta a comparação da densidade do metano no estado líquido  $\rho_l$ . Os valores de referência, obtidos pelas equações auxiliares de Wagner, são confrontados com as previsões da equação de estado de PR e de suas modificações MC e SV, avaliadas nas condições de saturação. As três formulações tendem a ter redução da  $\rho_l$  com o aumento da temperatura e a aproximação ao regime crítico, porém em quase toda a faixa superestimam a densidade em relação a Wagner, sobretudo nas temperaturas mais baixas. Perto do limite superior do gráfico as diferenças diminuem e as curvas tendem a se aproximar dos valores de referência.

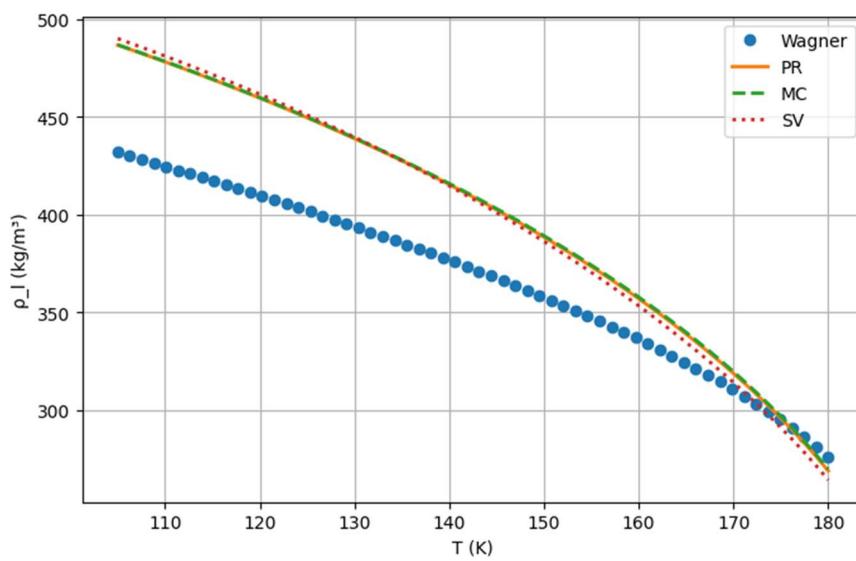


Figura 5. Densidade líquida do metano em saturação.

A Figura 6, apresenta o erro relativo de  $\rho_l$  das três formulações da equação de estado em relação à referência das equações auxiliares de Wagner. Observa-se superestimação mais acentuada em baixas temperaturas (cerca de 12-13% por volta de 105 K), que diminui continuamente com o aumento da temperatura. Entre 130-180 K os modelos PR e MC permanecem muito próximos. Perto do limite superior do intervalo, os erros se aproximam de zero e evoluem para valores negativos, indicando subestimação dos valores de referência, sendo a variante SV a que apresenta a maior variação.

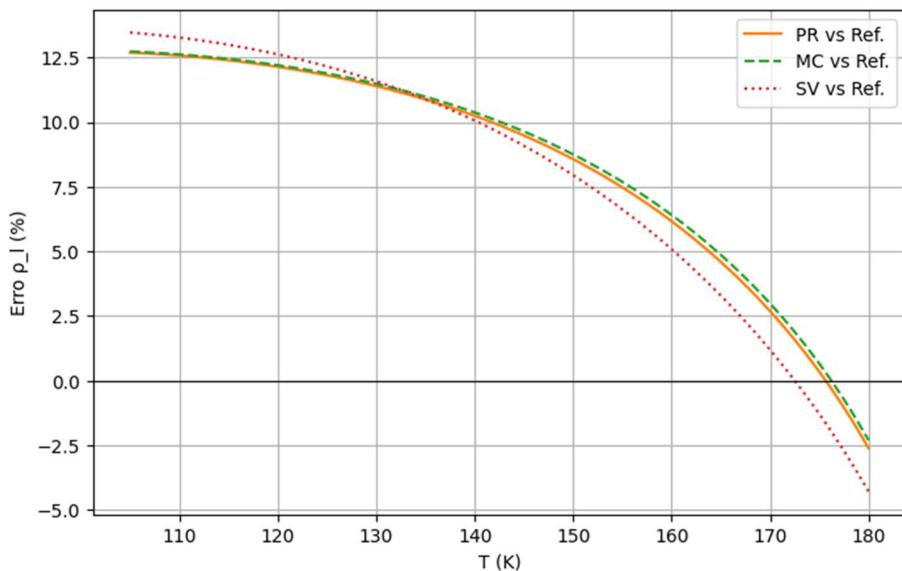


Figura 6. Erro relativo da densidade da fase líquida.

Conforme apresenta a Figura 7, a densidade do vapor saturado  $\rho_v$  do metano aumenta com a temperatura, tanto na série de referência de Wagner quanto nas três formulações da equação de estado. À medida que  $T$  aumenta, observa-se superestimação PR e MC permanecem muito próximas, com leve superestimação, enquanto SV passa a superestimar de forma mais acentuada a partir de 155 K.

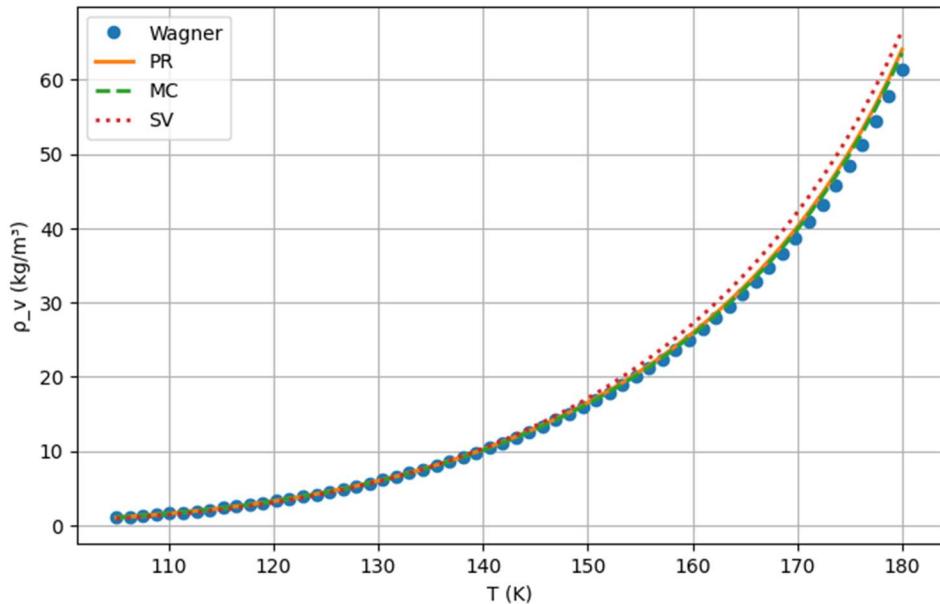


Figura 7. Densidade do vapor do metano em saturação.

Conforme apresenta a Figura 8, o erro percentual de  $\rho_v$  das três formulações em relação à referência de Wagner é pequeno nas temperaturas menores que 150 K para PR e MC (entre -1% e 1%), enquanto a SV subestima de forma acentuada para temperaturas menores que 130 K. À medida que  $T$  aumenta, PR e MC passam a superestimar moderadamente, mantendo-se abaixo de 5%, ao passo que a curva da SV cresce mais e se aproxima de 9% no extremo superior do intervalo.

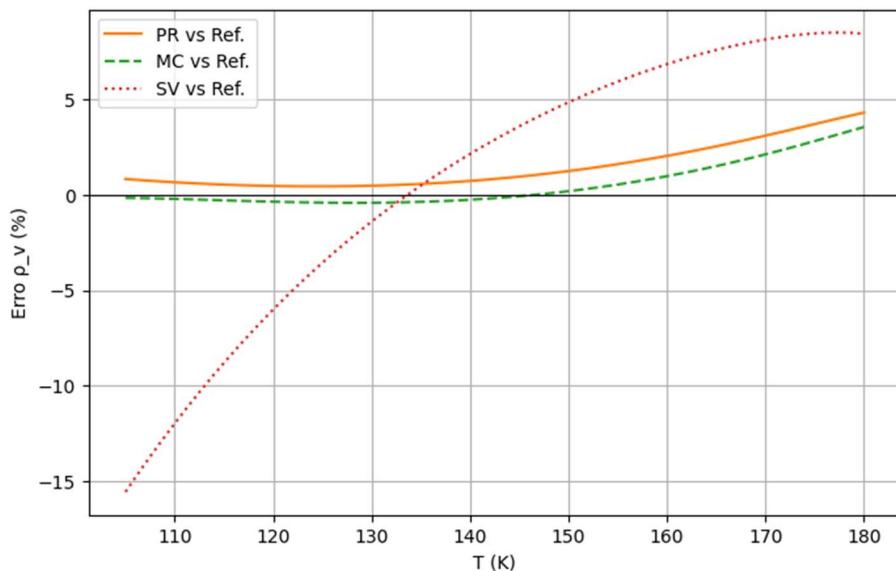


Figura 8. Erro relativo da densidade da fase vapor.

## 4 Conclusão

Na determinação da pressão de saturação os modelos PR, MC e SV ficam muito próximas da referência; a distinção aparece nos erros relativos sendo o modelo MC o que melhor acompanha as equações auxiliares de Wagner, PR mantém-se estável com desvios em torno de 1%, e SV apresenta as maiores discrepâncias.

Para as densidades em saturação, avaliadas nas mesmas condições, os modelos reproduzem bem as tendências globais observadas experimentalmente.

Na densidade da fase líquida, todos os modelos partem acima da referência nas menores temperaturas e convergem para erros próximos de zero ao se aproximar do crítico; ao final da faixa, PR e MC passam a prever valores ligeiramente abaixo da referência (-1% a -2%), enquanto SV se afasta um pouco mais em relação aos anteriores (cerca de - 4%).

Na densidade da fase vapor, PR e MC permanecem muito próximas da referência em quase toda a faixa, ao passo que SV passa de forte subestimação no início ( $\approx -15\%$ ) para superestimação nas maiores temperaturas ( $\approx +7\%$ ).

Em síntese, para metano puro na faixa subcrítica analisada, MC oferece a melhor predição para  $P^{sat}$  e densidades; a PR padrão fica logo atrás, com desempenho semelhante; e a SV, sem ajuste específico de parâmetros para o composto, tende a apresentar os maiores desvios, sobretudo em  $\rho_v$ .

## Agradecimentos

Os autores agradecem a Ufes, ao Ifes e a Capes pelo apoio financeiro.

## Referências bibliográficas

- Coquelet, C, Chapoy, A, Richon, D (2004) ‘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*. <https://doi.org/10.1023/B:IJOT.0000022331.46865.2f>.
- Echeverry, JSL, Acherman, SR, Lopez, EA (2017) ‘Peng–Robinson equation of state: 40 years through cubics’, *Fluid Phase Equilibria*. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2017.05.007>.
- Mathias, PM, Copeman, TW (1983) ‘Extension of the Peng–Robinson equation of state to complex mixtures: Evaluation of the various forms of the local composition concept’, *Fluid Phase Equilibria*. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(83\)80084-3](https://doi.org/10.1016/0378-3812(83)80084-3).
- NIST (2025) ‘NIST Chemistry WebBook’, U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology. <https://doi.org/10.18434/T4D303>.

- Peng, DY, Robinson, DB (1976) ‘A new two-constant equation of state’, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*. <https://doi.org/10.1021/i160057a011>.
- Sharifzadegan, A, Behnamnia, M, Monfared, AD. (2023). Artificial intelligence-based framework for precise prediction of asphaltene particle aggregation kinetics in petroleum recovery. *Scientific Reports*. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-45685-0>.
- Soave, G (1972) ‘Equilibrium constants from a modified Redlich–Kwong equation of state’, *Chemical Engineering Science*. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4)
- Stryjek, R, Vera, JH (1986a) ‘An improved cubic equation of state’, *American Chemical Society*. <https://doi.org/10.1021/bk-1986-0300.ch027>
- Stryjek, R, Vera, J H (1986b) ‘PRSV: An improved Peng–Robinson equation of state for pure compounds and mixtures’, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450640224>.
- Stryjek, R, Vera, JH (1986c) ‘PRSV2: a cubic equation of state for accurate vapor–liquid equilibria calculations’, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450640516>
- Setzmann, U, Wagner, W (1991) ‘A new equation of state and tables of thermodynamic properties for methane covering the range from the melting line to 625 K at pressures up to 1000 Mpa’, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. <https://doi.org/10.1063/1.555898>.
- Turnaoglu, T, Shiflett, MB (2019) ‘110th Anniversary: The first thermodynamic and kinetic analysis of ammonia in imidazolium-based ionic liquids using a gravimetric microbalance’, *Industrial & Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00274>