



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^{1,2,*}, Rita de Cassia Feroni³, Oldrich Joel Romero⁴

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

² Professor EBTB do Instituto Federal de Educação do Espírito Santo – Ifes, campus Colatina, ES, Brasil

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

⁴ 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: Este estudo avalia a equação de estado de Peng-Robinson (PR) e duas variações, com as 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 formulações foram implementadas em Python para calcular a pressão de saturação $P^{sat}(T)$, a densidade do líquido saturado ρ_l e a densidade do vapor saturado ρ_v . Em termos de $P^{sat}(T)$ observa-se boa concordância entre os modelos e a referência, e a comparação por desvios absolutos médios percentuais indica melhor desempenho do MC, seguido do SV e, por fim, do PR, ainda que as diferenças entre as curvas sejam pequenas. Para ρ_l , verifica-se superestimação em baixas temperaturas, com redução progressiva do erro à medida que a temperatura aumenta, e comportamento muito semelhante entre PR, MC e SV, porém com desvios elevados em relação à referência. Para ρ_v , os três modelos apresentam boa aderência na maior parte do intervalo, com leve vantagem de MC e SV, enquanto o PR tende a apresentar desvios um pouco maiores, sem discrepâncias relevantes.

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

Abstract: This study evaluates the Peng-Robinson (PR) equation of state and two variants using the Mathias-Copeman (MC) and Stryjek-Vera (SV) alpha correction functions for pure methane, adopting the Setzmann-Wagner ancillary equations as reference. The formulations were implemented in Python to calculate the saturation pressure $P^{sat}(T)$, the saturated liquid density ρ_l , and the saturated vapor density ρ_v . For $P^{sat}(T)$, a good visual agreement with the reference is observed, and the mean absolute percentage deviations indicate the best overall performance for MC, followed by SV and then PR, although the differences among the curves are small. For ρ_l , the models show overestimation at low temperatures, with a progressive reduction of the deviation as temperature increases; PR, MC, and SV exhibit very similar trends, but with large deviations relative to the reference. For ρ_v , the three models remain close to the reference over most of the interval, with a slight advantage for MC and SV, while PR tends to show somewhat larger deviations, without relevant discrepancies.

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 $Z_c = 0,307$, 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).

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

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

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

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 ω 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 $Z = \frac{Pv}{RT}$, $A = \frac{a\alpha(T)P}{R^2 T^2}$ 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.

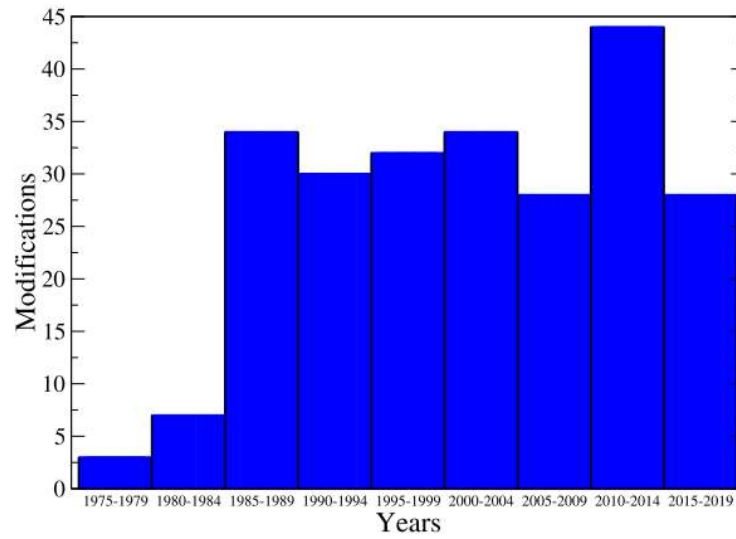


Figura 1. Modificações publicadas do PR desde 1976 até 2017 para compostos puros. Fonte: Echeverry et al. (2017)

O objetivo deste trabalho é apresentar uma análise comparativa entre a pressão de saturação P^{sat} , a densidade do líquido ρ_l e a densidade do vapor ρ_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.

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

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), mantém a Eq. 2 e é direcionada ao parâmetro k , apresentada pela Eq. 5,

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

onde $k_0 = 0,378893 + 1,4897153\omega - 0,17131848\omega^2 + 0,0196554\omega^3$. 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, conforme CoolProp (2026), $\omega = 0.01142$.

Os dados de referência da pressão de saturação P^{sat} e das densidades de líquido saturado ρ_l e de vapor saturado ρ_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 (ρ_l) e densidade de vapor saturado (ρ_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} , ρ_l e ρ_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.

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

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

em que $\varepsilon_{x,i}$ 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 φ o coeficiente de fugacidade. Dessa forma, a igualdade das fugacidades é equivalente à condição $\ln\varphi_l = \ln\varphi_v$. O coeficiente de fugacidade φ 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} , 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), ρ_l (Eq. 7), e ρ_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.

```

def alpha_soave(T, Tc, omega):
    Tr = T/Tc
    k = 0.37464 + 1.54226*omega - 0.26992*omega**2
    return (1.0 + k*(1.0 - np.sqrt(Tr)))**2

def alpha_MC_pura_s(T, Tc, c1, c2, c3):
    Tr = T/Tc
    s = 1.0 - np.sqrt(Tr)
    return (1.0 + c1*s + c2*s**2 + c3*s**3)**2

SV_k1, SV_k2, SV_k3 = -0.00159, 0.1521, 0.517

def alpha_PRSV_SV86(T, Tc, omega, k1=SV_k1, k2=SV_k2, k3=SV_k3):
    Tr = T/Tc
    rt = np.sqrt(Tr)
    k0 = (0.378893 + 1.4897153*omega
          - 0.17131848*omega**2 + 0.0196554*omega**3)
    k = k0 + (k1 + k2*(k3 - Tr)*(1.0 - rt))*(1.0 + rt)*(0.7 - Tr)
    return (1.0 + k*(1.0 - rt))**2

```

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.

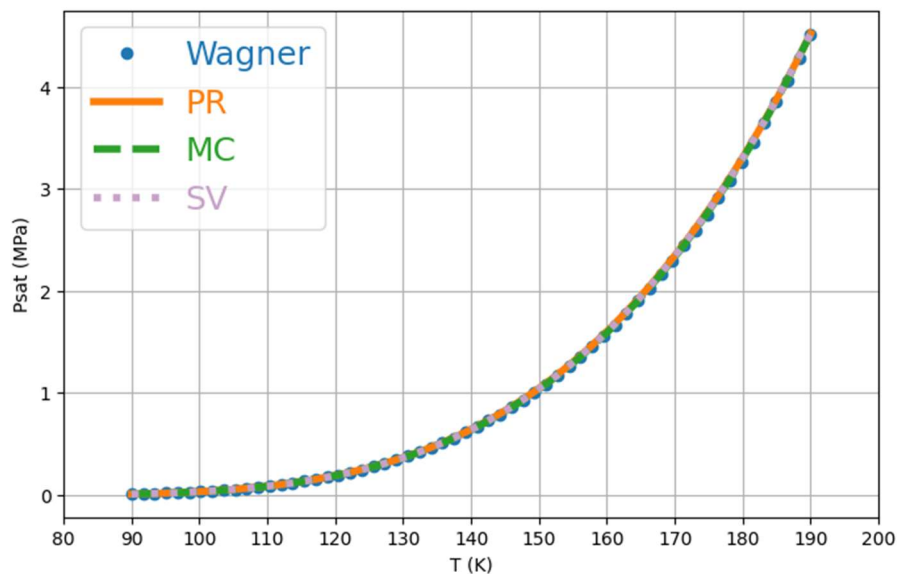


Figura 3. Comparação do $P^{sat}(T)$ entre os dados de referência de Wagner e os modelos PR, MC e SV.

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.

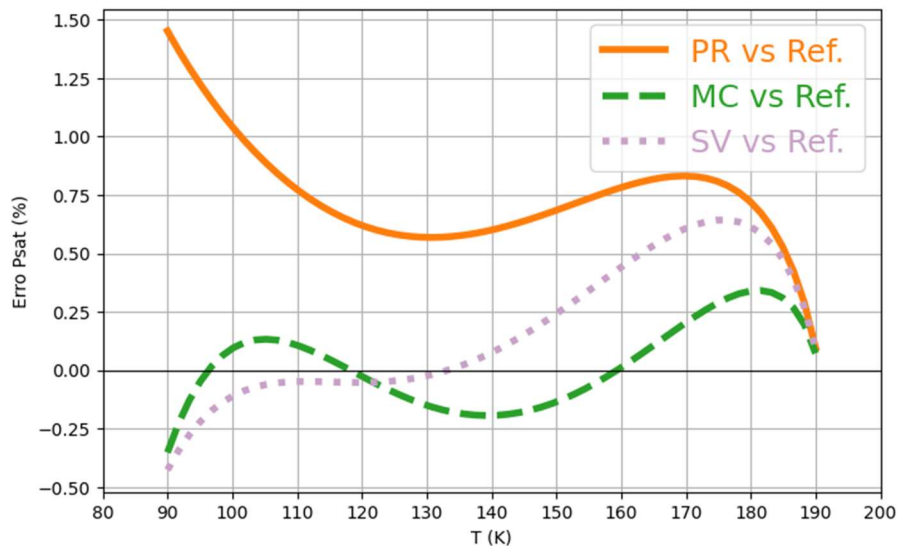


Figura 4. Comparação dos erros de Psat do metano: Wagner, PR, MC e SV.

Pela curva de erro relativo, o modelo de PR apresenta viés positivo em toda a faixa, partindo de cerca de 1,5% em 90 K e diminuindo à medida que a temperatura se aproxima de 190 K. A modificação MC é a que melhor concorda com a referência, pois oscila em torno de zero, com desvios pequenos, entre aproximadamente $-0,3\%$ e $+0,35\%$. Já o modelo de SV apresenta desempenho intermediário, com erros entre aproximadamente $-0,4\%$ e $+0,65\%$. Esses resultados também são corroborados pelo erro absoluto médio percentual, que foi: PR = 7,625, MC = 2,400 e SV = 5,003. Assim, observa-se que MC apresenta o menor erro, enquanto PR e SV exibem erros maiores, porém ainda da mesma ordem de grandeza.

A Figura 5 apresenta a comparação da densidade do metano no estado líquido ρ_l . Os valores de referência, obtidos pelas equações auxiliares de Wagner, são confrontados com as predições 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 ρ_l com o aumento da temperatura e a aproximação ao regime crítico. Perto do limite superior do gráfico as diferenças diminuem e as curvas tendem a se aproximar dos valores de referência.

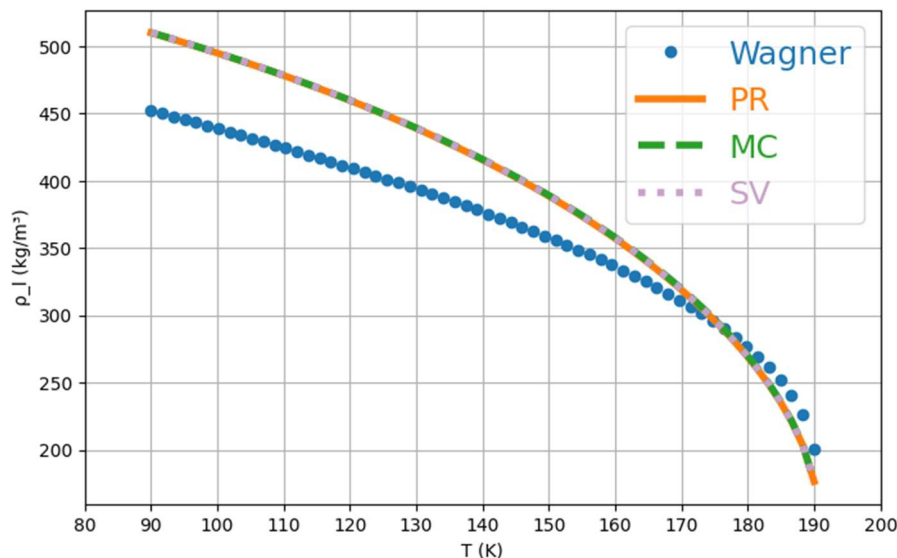


Figura 5. Densidade líquida do metano em saturação.

A Figura 6 mostra o erro relativo de ρ_l dos modelos PR, MC e SV em relação à referência de WAGNER. Em baixas temperaturas, há superestimação elevada dos três modelos (cerca de 12% a 13% entre 90 K e 110 K), que diminui de forma contínua com o aumento de T, cruza próximo de zero em torno de 175 K a 180 K e passa a valores negativos, chegando a aproximadamente -12% em 190 K. As três curvas ficam muito próximas em toda a faixa, com diferenças apenas sutis. Já o erro absoluto médio percentual

(AARD%) foi: PR = 34,966, MC = 35,230 e SV = 35,163. Assim, o PR apresentou desempenho ligeiramente melhor, mas não houve diferenças relevantes entre os três modelos.

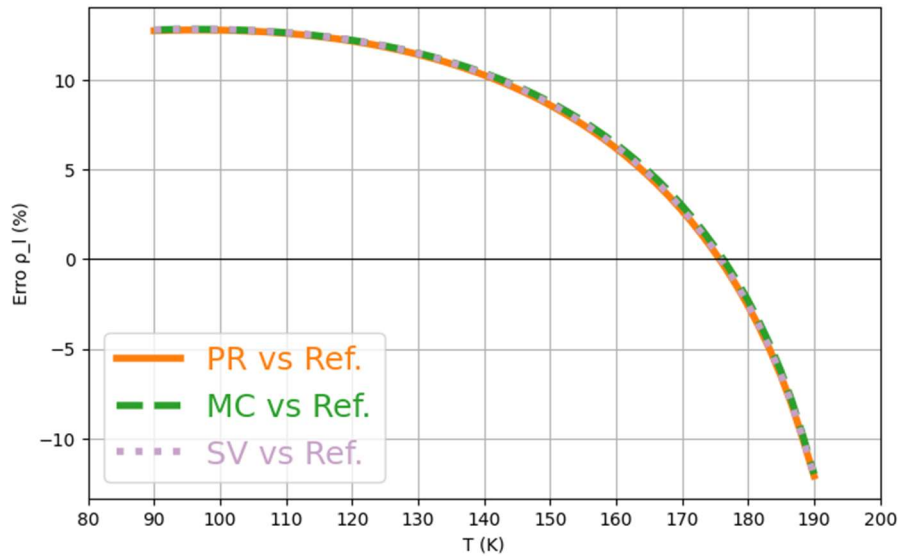


Figura 6. Erro relativo da densidade da fase líquida.

Conforme a Figura 7, a densidade do vapor saturado ρ_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 que os modelos PR, MC e SV permanecem muito próximos da referência ao longo de toda a faixa analisada.

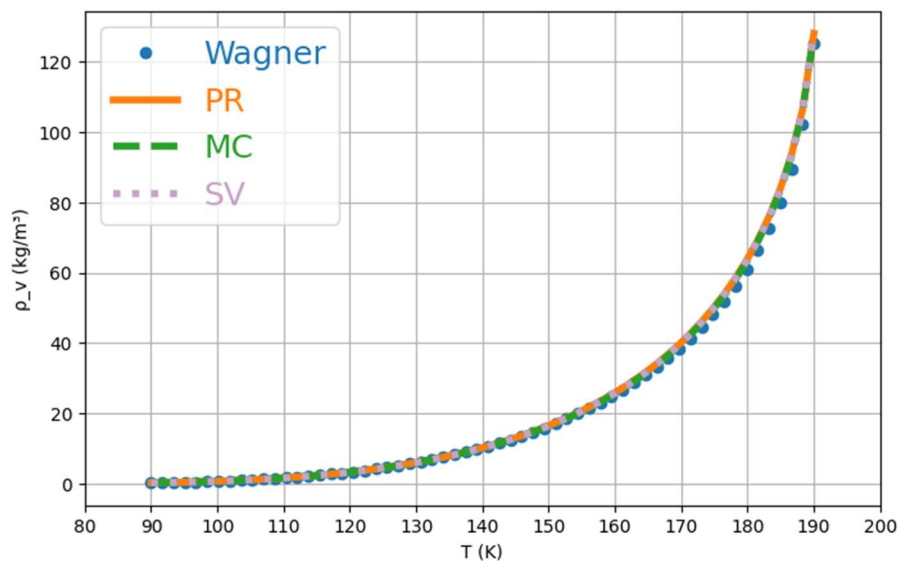


Figura 7. Densidade do vapor do metano em saturação.

Conforme a Figura 8, o erro percentual de ρ_v em relação à referência de WAGNER é baixo até cerca de 150 K. Nessa faixa, o PR permanece positivo, tipicamente entre aproximadamente 0,3% e 1,3%, enquanto MC e SV oscilam mais próximos de zero, entre cerca de -0,5% e +0,5%. A partir de aproximadamente 150 K, os três modelos passam a superestimar a referência e o erro cresce rapidamente, atingindo um máximo próximo a 188 K (cerca de 5%), com queda no ponto final próximo de 190 K. O erro absoluto médio percentual foi: PR = 0,687, MC = 0,543 e SV = 0,631, indicando diferenças pequenas, com leve vantagem do MC.

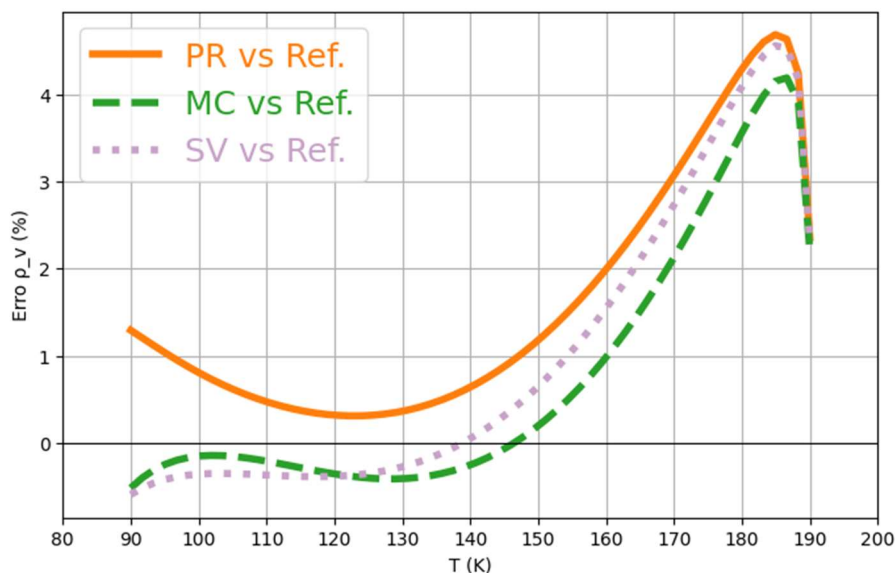


Figura 8. Erro relativo da densidade da fase vapor.

4 Conclusão

A comparação das variantes PR, MC e SV para metano, tomando Wagner como referência e avaliando P^{sat} , ρ_l e ρ_v , para a faixa de temperatura analisada, aponta as seguintes conclusões:

- Pressão de saturação (P^{sat}) – MC apresentou o melhor resultado global, com o menor desvio absoluto médio percentual neste parâmetro. SV teve desempenho intermediário sendo as diferenças entre os modelos pequenas;
- Densidade da fase líquida na linha de saturação (ρ_l) – Os três modelos (PR, MC e SV) exibiram os maiores desvios para a fase líquida em relação a referência, com desvios absolutos médios percentuais muito próximos entre si;
- Densidade da fase vapor na linha de saturação (ρ_v) – Os erros foram pequenos na maior parte da faixa analisada, e o desvio absoluto médio percentual permaneceu baixo, com leve vantagem do MC. Ainda assim, as diferenças entre os modelos foram pequenas;
- MC ficou mais próximo da referência (Wagner) para P^{sat} e ρ_v , com menores desvios absolutos médios percentuais. Para ρ_l , nenhuma das variantes se destacou, pois os desvios absolutos médios percentuais foram visíveis entre eles.

Agradecimentos

Os autores agradecem a UFES, ao IFES e a CAPES pelo apoio financeiro.

Referências bibliográficas

CoolProp (2026) ‘Methane fluid properties, CoolProp, fluid properties database’. https://coolprop.org/fluid_properties/fluids/Methane.html (accessed 14 January 2026).

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>