
Sumário

Prefácio.....	VII
Capítulo 1 $\blacktriangle$ <i>Equações de Estado</i>	1
1.1 Conceitos Introdutórios.....	1
1.2 Estados Correspondentes	4
Referências	20
Capítulo 2 $\blacktriangle$ <i>Equação de Estado do Virial</i>.....	21
2.1 Introdução.....	21
2.1.1 Equação do Virial – Série de Potência na Pressão	25
2.1.2 Equação do Virial – Séri e de Potência na Densidade Molar	29
2.2 Temperatura de Boyle	35
2.3 Segundo Coeficiente do Virial a partir da Teoria dos Estados Correspondentes ..	35
2.4 Temperatura de Boyle – Correlações Generalizadas para o Segundo Coeficiente do Virial.....	47
2.5 Propriedades Volumétricas de Misturas.....	54
2.5.1 Correlações Generalizadas para Mistura	56
2.6 Método de Hayden-O’Connell.....	63
2.6.1 Substâncias Puras.....	63
2.6.2 Temperatura de Boyle – Correlação de Hayden-O’Connell.....	73
2.6.3 Misturas – Correlação de Hayden-O’Connell	81
2.7 Segundo Coeficiente do Virial – Teoria Química.....	101
2.7.1 Equilíbrio Químico – Revisão.....	101
2.7.2 Teoria Química de Lambert	110

2.8	Teoria Química de Nothnagel <i>et alii</i> (1973).....	125
2.8.1	Volume e Área de van der Waals.	131
2.8.2	Parâmetros de Volume e de Área do Modelo UNIFAC	133
2.9	Combinação dos Métodos de Nothnagel e de Hayden-O'Connell	143
2.10	Terceiro Coeficiente do Virial.	145
	Referências	153
Capítulo 3	<i>Segundo coeficiente do virial – Potencial Intermolecular</i>	155
3.1	Introdução	155
3.2	Potencial de um Gás Ideal.	158
3.3	Potencial de Esfera Rígida.	158
3.4	Segundo Coeficiente de Mistura Gasosa – Potencial de Esfera Rígida.	160
3.5	Potencial de Poço Quadrado.	161
3.6	Segundo Coeficiente do Virial de Misturas Gasosas – Potencial de Poço Quadrado	164
3.7	Potencial Repulsivo – <i>Soft-Sphere</i>	165
3.8	Potencial de Sutherland.	168
3.9	Potencial de Esfera Rígida com Dipolo Permanente	172
3.10	Potencial de Lennard-Jones.	176
3.11	Segundo Coeficiente do Virial de Mistura – Potencial de Lennard-Jones	187
3.12	Potencial de Stockmayer	190
3.13	Segundo Coeficiente do Virial para Misturas Constituídas por Substâncias Polares e Apolares	207
3.14	Dedução da Função G_n	212
3.15	Função Gama	232
	Referências	242
Capítulo 4	<i>Equação Cúbica de Estado</i>	243
4.1	Generalização – Substância Pura	243
4.2	Determinação das Constantes Características	247
4.3	Forma Reduzida Explícita na Pressão	250
4.4	Coeficientes do Virial.	251
4.5	Temperatura de Boyle	256
4.6	Crítério de Estabilidade Mecânico	256
4.7	Comportamento das Equações Cúbicas de Estado	258
4.8	Método de Newton-Raphson – Pressão de Vapor.	265
4.9	Equação de van der Waals	269
4.9.1	Temperatura e Pressão Independentes	271
4.9.2	Temperatura e Volume Independentes.	275

4.9.3	Coeficientes do Virial.	276
4.9.4	Temperatura de Boyle de Fluidos de van der Waals.	277
4.9.5	Estados Correspondentes de van der Waals	277
4.9.6	Comportamento Volumétrico de van der Waals	279
4.9.7	Pressão de Vapor de Fluidos vdW.	280
4.10	Equação de Redlich-Kwong e suas Modificações	286
4.10.1	Temperatura e Pressão Independentes	291
4.10.2	Temperatura e Volume Molar Independentes	295
4.10.3	Coeficientes do Virial.	297
4.10.4	Temperatura de Boyle para Fluidos de Redlich-Kwong.	299
4.10.5	Temperatura de Boyle Reduzida de Fluidos SRK	299
4.10.6	Temperatura de Boyle Reduzida de Fluidos de Wilson	301
4.10.7	Estados Correspondentes – Fluido de Redlich-Kwong e suas Modificações	302
4.10.8	Determinação do Parâmetro α da Equação de Wilson	306
4.10.9	Determinação do Parâmetro α da Equação SRK	314
4.10.10	Parâmetro m da Equação SRK	320
4.10.11	Comportamentos Volumétricos de Fluidos RK	328
4.10.12	Comportamentos Volumétricos de Fluidos Wilson	329
4.10.13	Comportamentos Volumétricos de Fluidos SRK	331
4.10.14	Método de Newton-Raphson – Pressão de Vapor.	333
4.11	Peng-Robinson e Peng-Robinson-Stryjek-Vera	341
4.11.1	Temperatura e Pressão Independentes	347
4.11.2	Temperatura e Volume Molar Independentes	350
4.11.3	Coeficientes do Virial.	352
4.11.4	Temperatura de Boyle de Fluidos de Peng-Robinson.	354
4.11.5	Estados Correspondentes – Fluido de Peng-Robinson	355
4.11.6	Parâmetro α da Equação de Estado de Peng-Robinson	356
4.11.7	Comportamentos Volumétricos de Peng-Robinson	358
4.11.8	Método de Newton-Raphson – Pressão de Vapor.	360
4.12	Equação de Estado de Harmens-Knapp	364
4.12.1	Temperatura e Pressão Independentes	370
4.12.2	Temperatura e Volume Molar Independentes	374
4.12.3	Coeficientes do Virial.	376
4.12.4	Temperatura de Boyle de Fluidos de Harmens-Knapp	378
4.12.5	Estados Correspondentes de Harmens-Knapp	382
4.12.6	Comportamento Volumétrico de Fluidos de Harmens-Knapp	385
4.12.7	Pressão de Vapor – Harmens-Knapp.	387

4.13	Equação de Estado de Schmidt-Wenzel	392
4.13.1	Temperatura e Pressão Independentes	399
4.13.2	Temperatura e Volume Molar Independentes	402
4.13.3	Estimativas dos Coeficientes do Virial	404
4.13.4	Temperatura de Boyle Reduzida Schmidt-Wenzel.....	406
4.13.5	Estados Correspondentes – Fluidos de Schmidt-Wenzel	408
4.13.6	Comportamentos Volumétricos de Fluidos de Schmidt-Wenzel	409
4.13.7	Método de Newton-Raphson – Pressão de Vapor.....	411
4.14	Equação de Patel-Teja	416
4.14.1	Temperatura e Pressão Independentes	422
4.14.2	Temperatura e Volume Molar Independentes	428
4.14.3	Estimativas dos Coeficientes do Virial de Fluidos PT.....	430
4.14.4	Temperatura de Boyle Reduzida – Fluidos de Patel-Teja.....	433
4.14.5	Estados Correspondentes – Fluidos de Patel-Teja	434
4.14.6	Comportamento Volumétrico de Fluido de Patel-Teja.....	436
4.14.7	Método de Newton-Raphson – Pressão de Vapor.....	438
4.15	Misturas.....	443
4.16	Mistura – Equação de van der Waals	446
4.16.1	Temperatura, Volume Molar e Fração Molar.....	447
4.16.2	Temperatura, Pressão e Composições Independentes	449
4.17	Mistura RK, Wilson e SRK.....	452
4.17.1	Temperatura, Volume Molar e Frações Molares	453
4.17.2	Temperatura, Pressão e Composições Independentes	456
4.18	Peng-Robinson e Peng-Robinson-Stryjek-Vera	462
4.18.1	Temperatura, Volume Molar e Composições.....	463
4.18.2	Temperatura, Pressão e Composições Independentes	464
4.19	Mistura – Equação de Patel-Teja	467
4.19.1	Temperatura, Volume Molar e Composições.....	469
4.19.2	Temperatura, Pressão e Composições Independentes	471
4.20	Teorema Binomial	475
	Referências	476

Capítulo 5	<i>Equação de Estado BWR e Modificações</i>	479
5.1	Equação de Estado BWR.....	479
5.2	Equação BWR-Starling.....	483
5.3	Segundo Coeficiente do Virial	484
5.3.1	Coeficientes do virial – Equação de Estado BWR	486
5.3.2	Coeficientes do virial – Equação de Estado BWR-Starling.....	487

5.4	Temperatura de Boyle	490
5.4.1	Temperatura de Boyle – Equação de Estado BWR	490
5.4.2	Temperatura de Boyle – Equação de Estado BWRS	492
5.5	Temperatura e Volume Molar Independentes	495
5.5.1	Equação de estado BWR	495
5.5.2	Equação de estado BWRS	497
5.5.3	Temperatura e Pressão Independentes	498
5.5.4	Equação de Estado BWR	502
5.5.5	Equação de Estado BWRS	508
5.6	Misturas – Equação de Estado BWR	515
5.6.1	Temperatura, Volume Molar e Frações Molares Independentes	516
5.6.2	Temperatura, Pressão e Frações Molares Independentes	519
5.7	Misturas – Equação de Estado BWRS	522
5.7.1	Temperatura, Volume Molar e Frações Molares Independentes	523
5.7.2	Temperatura, Pressão e Frações Molares Independentes	526
	Referências	530
Capítulo 6	▲ Equação de Estado de Lee-Kesler	533
6.1	Substância Pura	533
6.2	Equação de Pressão de Vapor	535
6.3	Temperatura e Pressão de Saturação Reduzida do Fluido Simples	541
6.4	Cálculos das Propriedades Volumétricas	543
6.4.1	Roteiro de Cálculo – Fator de Compressibilidade	547
6.4.2	Roteiro de Cálculo para o Volume Molar	556
6.5	Segundo Coeficiente do Virial	561
6.6	Temperatura de Boyle	565
6.7	Estados Correspondentes – Fluido Simples	569
6.8	Estados Correspondentes – Fluido de Referência	570
6.9	Coeficiente Angular – Correção Geométrica	571
6.10	Misturas	571
	Referências	600
Anexo A	▲ Solução Analítica de Equações Algébricas	601
A.1	Introdução	601
A.2	Cálculo de Raízes	601
A.3	Equação do Segundo Grau	604
A.3.1	Primeiro Caso	605
A.3.2	Segundo Caso	606
A.3.3	Terceiro Caso	606

A.4	Equação de Terceiro Grau	607
A.4.1	Primeiro e Segundo Casos	609
A.4.2	Terceiro Caso	614
A.5	Roteiro de Cálculo	623
Anexo B	▲ Solução Numérica de Equações não Lineares.	627
B.1	Introdução	627
B.2	Método da Bissecção	628
B.3	Método da Falsa-Posição – Regula-Falsi.	630
B.4	Método de Newton-Raphson	634
B.5	Método de Newton-Raphson Modificado	636
B.6	Método da Secante	636
	Referências	639
Anexo C	▲ Método dos Mínimos Quadrados	641
C.1	Modelo Polinomial – Constante Diferente de Zero	643
C.2	Modelo Polinomial – Constante Igual a Zero	648
C.3	Qualidade do Ajuste Polinomial – Constante Diferente de Zero	654
C.3.1	Análises de Variâncias e Erros Padrões	658
C.3.2	Intervalos de Confiança dos Coeficientes	659
C.3.3	Roteiro de Cálculo	660
C.4	Qualidade do Ajuste Polinomial – Constante Igual a Zero	661
C.4.1	Análises de Variâncias e Erros Padrões	666
C.4.2	Intervalos de Confiança dos Coeficientes	667
C.4.3	Roteiro de Cálculo	667
C.5	Valores Críticos da Distribuição t de Student	669
	Referências	676
Anexo D	▲ Série de Taylor	677
D.1	Introdução	677
D.2	Série de Taylor de Uma Variável	677
D.3	Série de Taylor de Duas Variáveis	677
D.4	Série de Taylor de Três Variáveis	682
D.5	Série de Taylor Multidimensional	688
	Referências	693
Anexo E	▲ Parâmetros Característicos da Equação Cúbica Generalizada	695
E.1	Cálculo da Derivada $(\partial P / \partial V)_T$	696

E.2	Cálculo da Derivada $(\partial^2 P / \partial V^2)_T$	697
E.3	Equação de Estado Cúbica Generalizada	698
E.4	Equação de van der Waals	699
E.4.1	Parâmetros Característicos – Método 1	699
E.4.2	Parâmetros Característicos – Método 2	701
E.5	Equação de Redlich-Kwong e suas Modificações	702
E.5.1	Parâmetros Característicos – Método 1	703
E.5.2	Parâmetros Característicos – Método 2	708
E.6	Equação de PENG-Robinson	710
E.6.1	Parâmetros Característicos Método 1	710
E.6.2	Parâmetros Característicos – Método 2	714