



## **Segundo coeficiente virial y temperatura de boyle usando una ecuación de estado aplicada a yacimientos**

**Leonardo Cupil Jiménez**

[leolipuc@gmail.com](mailto:leolipuc@gmail.com)

[sarai.alejandro@ujat.mx](mailto:sarai.alejandro@ujat.mx)

[david.guerrero@ujat.mx](mailto:david.guerrero@ujat.mx)

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco  
Jalpa de Méndez, Tabasco, México

### **RESUMEN**

Las ecuaciones de estado (EdE) son modelos matemáticos que permiten calcular las propiedades termodinámicas de las sustancias. En este trabajo se llevó a cabo la estimación del segundo coeficiente virial y la temperatura de Boyle usando una EdE cúbica de tres parámetros desarrollada para aplicaciones en yacimientos de petróleo y gas natural, para determinar su capacidad de predicción a condiciones supercríticas. Los resultados se compararon con valores recomendados en la literatura y se calcularon el error absoluto medio, el sesgo y el error medio cuadrático para determinar la precisión y exactitud de las predicciones, además, estos estadísticos se correlacionaron con el factor acéntrico. Se encontró que la EdE cúbica de tres parámetros predice el segundo coeficiente virial con un error absoluto medio de 0.06, semejante a las EdE cúbicas de dos parámetros; en todos los casos se observa una disminución de la precisión en la predicción cuando las moléculas se alejan del modelo de esfera. Para la temperatura de Boyle se encontró que la EdE cúbica de tres parámetros presenta un comportamiento parabólico con un valor mínimo para un factor acéntrico de 1.80, mientras que las EdE cúbicas de dos parámetros presentan un comportamiento asintótico.

**Palabras clave:** ecuaciones cúbicas; peng-robinson; soave; esmaeilzadeh-roshanfekr.

## **Second virial coefficient and Boyle temperature using an equation of state for reservoirs**

### **ABSTRACT**

The Equations of State (EoS) are mathematical models to compute thermodynamic properties for substances. In this work, we calculate the second virial coefficient and Boyle's temperature using a three-parameter cubic EoS developed for oil and natural gas reservoirs application to establish its ability to calculate thermodynamic properties in supercritical regions. The results were compared with recommended values from the literature, and the average absolute deviation, BIAS, and Root-Square Mean Deviation were computed to find the accuracy of the EoS; furthermore, these statistical values were correlated with the acentric factor. For the three-parameter cubic EoS, the second virial coefficient is predicted with an average absolute deviation of 0.06, like the value obtained for two parameters cubic EoS. The three EoS studied indicate a drop of accuracy when the molecule goes away from the spherical model. For Boyle's temperature, we found that three-parameter cubic EoS shows a parabolic behavior with a minimum value for acentric factor equal to 1.80. In contrast, two-parameter cubic EoS shows an asymptotic behavior.

**Keywords:** cubic equations; peng-robinson; soave; esmaeilzadeh-roshanfekr.

Artículo recibido: 10. Junio. 2021

Aceptado para publicación: 16. Julio. 2021

Correspondencia: [david.guerrero@ujat.mx](mailto:david.guerrero@ujat.mx)

Conflictos de Interés: Ninguna que declarar

## 1. INTRODUCCIÓN

Desde la postulación de la tesis doctoral de Van der Waals (VdW) (Van der Waals, 1873) se ha encontrado una diversidad de aplicaciones para las EdE, principalmente las cúbicas, caracterizadas por ser modelos matemáticos sencillos que permiten predecir el comportamiento PVT de las sustancias y estimar las propiedades termodinámicas de componentes puros y mezclas en fase homogénea y heterogénea, tales como el Equilibrio Líquido – Vapor (ELV). En la literatura existen una infinidad de EdE, que varían en grado de complejidad dependiendo de su aplicación, siendo las más utilizadas en la industria de los hidrocarburos y la simulación de procesos químicos las cúbicas con dos parámetros, tales como la propuesta por Redlich y Kwon (RK) (Redlich & Kwong, 1949), Peng y Robinson (PR) (Peng & Robinson, 1976) o la modificación hecha por Soave a la EdE de RK (SRK) (Soave, 1972). De forma general, la familia de las EdE de VdW pueden ser representadas por

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v^2 + uv + w} \quad (1)$$

$$a = \Omega_a \left( \frac{R^2 \cdot T_c^2}{P_c} \right) \alpha(T) \quad (2)$$

$$b = \Omega_b \left( \frac{R \cdot T_c}{P_c} \right) \quad (3)$$

*donde*  $P$ ,  $R$ ,  $T$  y  $v$  son la presión absoluta, la constante universal del gas ideal, la temperatura absoluta y el volumen molar, respectivamente. Los parámetros  $a$  y  $b$  representan las fuerzas moleculares atractivas y repulsivas; el subíndice  $C$  indica la propiedad en el punto crítico, los parámetros  $\Omega_a$  y  $\Omega_b$  son específicos para la EdE y  $\alpha$  es una función de la temperatura;  $u$  y  $w$  dependen de la forma de la EdE, si es de dos parámetros, estarán relacionados con  $b$ ; en caso de modificaciones para el desarrollo de una EdE de 3 parámetros,  $u$  y  $w$  pueden estar relacionadas con  $b$  u otras propiedades como el factor acéntrico o incluso un nuevo parámetro  $c$  (Esmailzadeh & Roshanfekr, 2006). La elección del parámetro dependerá de la modificación que se pretenda llevar a cabo en la EdE; algunos autores han intentado mejorar la predicción de las propiedades de la fase líquida, principalmente en el ELV, tal es el caso de la EdE propuesta por Esmailzadeh y Roshanfekr (2006) (ER), en la que se propone que el factor de compresibilidad ( $Z$ ) sea diferente para cada sustancia, mejorando la predicción de las

propiedades termodinámicas del líquido saturado, favoreciendo así su aplicación a los fluidos en los yacimientos petroleros. La EdE ER se muestra a continuación:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + c) + c(v - c)} \quad (4)$$

*sujeta a las siguientes restricciones:*

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T,c} \Big|_c = 0 \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_{T,c} \Big|_c = 0 \quad (6)$$

$$\zeta_c = \frac{P_c \cdot v_c}{R \cdot T_c} \quad (7)$$

*donde* el parámetro  $\zeta_c$  se denomina factor de compresibilidad crítico empírico y puede ser un valor constante para cada sustancia o estimarse como una función del factor acéntrico y la temperatura; los parámetros  $a$  y  $b$  para la Ec. 4 se obtiene a partir de las Ecs. 2 y 3, mientras que el parámetro  $c$  se calcula mediante:

$$c = \Omega_c \left(\frac{R \cdot T_c}{P_c}\right) \quad (8)$$

los parámetros  $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$  y  $\Omega_c$  se calculan mediante el procedimiento descrito en el apartado Estrategias Metodológicas.

La EdE PR se validó para conocer sus capacidades en la predicción de la densidad del líquido y el vapor saturado, la presión de vapor, así como la entalpía y entropía de vaporización, para sustancias puras presentes en los yacimientos petroleros (Esmailzadeh & Roshanfekar, 2006). Además, en otros trabajos se han llevado a cabo algunas modificaciones de la ecuación ER, tales como: obtener los parámetros de solubilidad de Hildebrand (Eslamimanesh & Esmailzadeh, 2010), modificar la función  $\alpha$  para mejorar la predicción del comportamiento  $PvT$  (Bonyadi & Esmailzadeh, 2008) y del ELV (Esmailzadeh & Samadi, 2008) para las sustancias puras y las mezclas, estimación del coeficiente de Joule-Thompson (Akhouri & Kaur, 2019), predicción de la formación de hidratos de gas (Khan, Kumari, Dixit, Majumder, & Arora, 2020; Talaghat, 2009), aplicaciones en la industria del petróleo y gas como la simulación de yacimientos de gas seco (Ejraei Bakyani, Taghizadeh, Nematollahi Sarvestani, Esmailzadeh, & Mowla, 2018) o la precipitación de asfaltenos (Nourbakhsh, Yazdizadeh, & Esmailzadeh, 2011), así como la predicción de las densidades en

líquidos iónicos (Farzi & Esmailzadeh, 2016a) y la tensión superficial (Farzi & Esmailzadeh, 2016b). Sin embargo, existen otras propiedades termodinámicas que no han sido verificadas con esta EdE, como el segundo coeficiente virial ( $B$ ) y la temperatura de Boyle ( $T_B$ ), que se utilizan como punto de validación para la predicción de vapor sobrecalentado y a condiciones supercríticas. En este trabajo se llevó a cabo la predicción del segundo coeficiente virial y la temperatura de Boyle para 16 sustancias, que representan compuestos que se encuentran comúnmente en la industria del petróleo y el gas natural, utilizando la EdE propuesta por Esmailzadeh y Roshanfekr, considerando el factor de compresibilidad empírico independiente (ER1) y dependiente (ER2) de la temperatura. Se llevaron a cabo comparaciones con las EdE PR y SRK, tomándolas como referencia debido a su amplio uso en la industria del petróleo y el gas natural.

## 2. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS

El segundo coeficiente virial ( $B$ ) se puede determinar a partir de las EdE, de acuerdo con la definición

$$B = \lim_{\rho \rightarrow 0} \left( \frac{\partial Z}{\partial \rho} \right)_T \quad (9)$$

donde  $\rho$  es la densidad molar. Para poder obtener una expresión que permita calcular  $B$  a partir de la Ec. 1, es necesario convertir el volumen molar a densidad molar, posteriormente usar la definición  $Z = P/\rho RT$ , derivar con respecto a la densidad molar a temperatura constante y aplicar el límite en el que  $\rho \rightarrow 0$ , obteniendo:

$$B = b - \frac{a(T)}{RT} \quad (10)$$

La Ec. 10 puede expresarse en su forma reducida, si se sustituyen  $a$  y  $b$  por las expresiones en las Ecs. 2 y 3 y se define el segundo coeficiente virial reducido como

$$\hat{B} = \frac{P_c B}{RT_c} = \Omega_b - \frac{\Omega_a \alpha(\theta)}{\theta} \quad (11)$$

De esta forma, la Ec. 11 es función del factor acéntrico y la temperatura reducida. Para la ecuación ER1 y ER2, es necesario llevar a cabo el siguiente procedimiento: primero se encuentra el valor de  $\Omega_c$  tomando la raíz más pequeña obtenida al resolver la función no lineal

$$f(\Omega_c) = \Omega_c^3 + \left( 3\zeta_c - \frac{5}{8} \right) \Omega_c^2 + \left( 3\zeta_c^2 - \frac{3}{4}\zeta_c \right) \Omega_c + \zeta_c^3 - \frac{3}{8}\zeta_c^2 \quad (12)$$

En este trabajo se usó el método de Tartaglia-Cardano (Soto & Mosquera López, 2018) para resolver la Ec. 12, ya que el discriminante permite distinguir si la ecuación no lineal cuenta con una, dos o tres raíces reales y así determinar cuál es la menor. El factor de compresibilidad crítico empírico puede obtenerse como un valor constante para cada sustancia, dependiente del factor acéntrico ( $\omega$ )

$$\zeta_c = 0.3284438 - 0.0690264 \cdot \omega + 0.0078711 \cdot \omega^2 \quad (13)$$

o puede ser considerado dependiente de la temperatura al superar cierto valor para la temperatura reducida ( $\theta$ ), de acuerdo con las siguientes condiciones: si  $\theta < \theta'$ ,  $\zeta_c$  se obtiene de la Ec. 13; si  $\theta > \theta'$ , utilizar la Ec. 14

$$\zeta'_c = \zeta_c - (\zeta_c - Z_c) \left( \frac{\theta' - \theta}{\theta' - 1} \right) \quad (14)$$

para conocer la temperatura reducida límite en el que  $\zeta_c$  es independiente de la temperatura ( $\theta'$ ), se usa la Ec. 15

$$\theta' = 0.789216 + 0.1585581 \cdot \omega - 0.133193 \cdot \omega^2 \quad (15)$$

En caso de no conocer el factor de compresibilidad crítico de la sustancia, se puede usar la correlación propuesta por Nath (Nath, 1982)

$$Z_c = 0.2908 - 0.0825 \cdot \omega \quad (16)$$

Una vez conocidos los valores de  $\Omega_c$ ,  $\zeta_c$  o  $\zeta'_c$ , se pueden evaluar  $\Omega_a$  y  $\Omega_b$  mediante

$$\Omega_b = 2\Omega_c - 1 + 3\zeta_c \quad (17)$$

$$\Omega_a = 3\zeta_c^2 + \Omega_c^2 + 2\Omega_b\Omega_c + 2\Omega_c \quad (18)$$

finalmente, el parámetro  $\alpha$  se evalúa usando

$$\alpha = [m_1 + m_2(1 - \theta^{0.5})]^2 \quad (19)$$

$$m_1 = 0.999035 - 0.01061842 \cdot \omega - 0.0081174 \cdot \omega^2 \quad (20)$$

$$m_2 = 0.4400108 + 1.5297151 \cdot \omega - 0.4710752 \cdot \omega^2 \quad (21)$$

Para las EdE PR y SRK, los parámetros  $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$  y  $\alpha$  se encuentran en la Tabla 1.

**Tabla 1.** Parámetros para la ecuación de estado de PR (Peng & Robinson, 1976) y SRK (Soave, 1972).

EdE	$\Omega_a$	$\Omega_b$	$\alpha$
PR	0.45724	0.07780	$[1 + (0.37464 + 1.54226 \cdot \omega - 0.26992 \cdot \omega^2)(1 - \theta^{0.5})]^2$
SRK	0.42747	0.08664	$[1 + (0.480 + 1.574 \cdot \omega - 0.176 \cdot \omega^2)(1 - \theta^{0.5})]^2$

Por otra parte, la temperatura de Boyle es aquella en la cual el segundo coeficiente virial se iguala con cero (Mamedov & Somuncu, 2020); a partir de la Ec. 11 se obtiene

$$f(\theta_B) = \Omega_b - \frac{\Omega_a \alpha(\theta_B)}{\theta_B} \quad (22)$$

donde  $\theta_B$  es la temperatura de Boyle reducida. La raíz para la Ec. 22 se obtuvo utilizando el método Gradiente Reducido Generalizado (GRG, por sus siglas en inglés), usando derivadas numéricas centrales y una tolerancia de  $1 \times 10^{-6}$ , tomando como variable independiente el factor acéntrico.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla 2 se proporciona la lista de sustancias empleadas para llevar a cabo la predicción del segundo coeficiente virial; una vez obtenidos los valores para esta propiedad, se evaluaron el Error Absoluto Medio (EAM) y el Sesgo (S), de acuerdo con:

$$EAM = \frac{1}{npts} \sum_{i=1}^{npts} |\hat{B}_i^{cal} - \hat{B}_i^{exp}| \quad (23)$$

$$S = \frac{1}{npts} \sum_{i=1}^{npts} \hat{B}_i^{cal} - \hat{B}_i^{exp} \quad (24)$$

donde  $npts$  se refiere al número de datos experimentales utilizados en la comparación, para cada sustancia;  $\hat{B}_i$  es el segundo coeficiente virial reducido, de acuerdo con la Ec. 11, finalmente, los superíndices *cal* y *exp* hacen referencia a los datos calculados y experimentales recomendados (Dymond, Marsh, Wilhoit, & Wong, 2002), respectivamente. Los errores no se normalizaron, ya que al aproximarse a la temperatura de Boyle el segundo coeficiente virial tiende a cero, ocasionando que el error porcentual tienda a infinito. El *EAM* proporciona información de la desviación promedio entre los valores calculados con las EdE y los determinados experimentalmente, entre más se aproxima a cero las predicciones son más precisas. Por otro lado, el *S* es un indicador de la sobrepredicción (si *S* es positivo) o subpredicción (si *S* es negativo) de la EdE.

Se observa que las cuatro EdE tienen un *EAM* y un *S* en el mismo orden de magnitud, en promedio; sin embargo, la EdE SRK presenta un *EAM* superior para los hidrocarburos con más de cinco carbonos.

**Tabla 2.** Sustancias y factor acéntrico ( $\omega$ ) utilizados para la estimación del segundo coeficiente virial y la temperatura de Boyle. Resultados para el Error Absoluto Medio (EAM) y el Sesgo (S), para cada sustancia y promedio para cada ecuación de estado.

Sustancia	$\omega$	ER1		ER2		SRK		PR	
		EAM	S	EAM	S	EAM	S	EAM	S
Argón (Ar)	0.0000 <sup>a</sup>	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.03	0.04	0.00
Monóxido de carbono (CO)	0.0660 <sup>b</sup>	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.02
Dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	0.2280 <sup>b</sup>	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.01
Metano (C <sub>1</sub> )	0.0120 <sup>b</sup>	0.02	0.00	0.02	0.01	0.02	0.01	0.03	-0.02
Etano (C <sub>2</sub> )	0.1000 <sup>b</sup>	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.02	0.03	-0.02
Propano (C <sub>3</sub> )	0.1520 <sup>b</sup>	0.04	0.03	0.04	0.03	0.05	0.05	0.05	0.01
<i>n</i> -Butano ( <i>n</i> -C <sub>4</sub> )	0.2000 <sup>b</sup>	0.06	0.05	0.06	0.05	0.07	0.07	0.07	0.03
<i>i</i> -Butano ( <i>i</i> -C <sub>4</sub> )	0.1840 <sup>b</sup>	0.03	0.02	0.03	0.01	0.04	0.04	0.04	0.00
<i>n</i> -Pentano ( <i>n</i> -C <sub>5</sub> )	0.2520 <sup>b</sup>	0.08	0.07	0.08	0.06	0.09	0.09	0.08	0.06
<i>i</i> -Pentano ( <i>i</i> -C <sub>5</sub> )	0.2280 <sup>b</sup>	0.06	0.05	0.06	0.05	0.08	0.08	0.06	0.04
<i>n</i> -Heptano ( <i>n</i> -C <sub>7</sub> )	0.3500 <sup>b</sup>	0.06	0.05	0.06	0.05	0.08	0.08	0.06	0.05
<i>n</i> -Octano ( <i>n</i> -C <sub>8</sub> )	0.4000 <sup>b</sup>	0.14	0.12	0.14	0.12	0.17	0.17	0.15	0.13
Benceno (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	0.2100 <sup>b</sup>	0.12	0.11	0.12	0.11	0.14	0.14	0.13	0.10
Tolueno (C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	0.2640 <sup>b</sup>	0.15	0.14	0.15	0.15	0.18	0.18	0.15	0.15
Propileno (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> )	0.1410 <sup>b</sup>	0.03	-0.02	0.03	-0.02	0.04	-0.04	0.04	0.02
Sulfuro de hidrógeno (H <sub>2</sub> S)	0.0942 <sup>a</sup>	0.01	0.01	0.01	0.01	0.03	0.03	0.01	-0.01
Promedio		0.06	0.04	0.06	0.04	0.07	0.06	0.06	0.03

<sup>a</sup> (Yaws & Narasimhan, 2009a); <sup>b</sup> (Yaws & Narasimhan, 2009b). Ecuaciones de estado: Esmailzadeh-Roshanfekar factor de compresibilidad empírico independiente (ER1) y dependiente (ER2) de la temperatura (Esmailzadeh & Roshanfekar, 2006); Soave-Redlich-Kwon (SRK) (Soave, 1972); Peng-Robinson (PR) (Peng & Robinson, 1976).

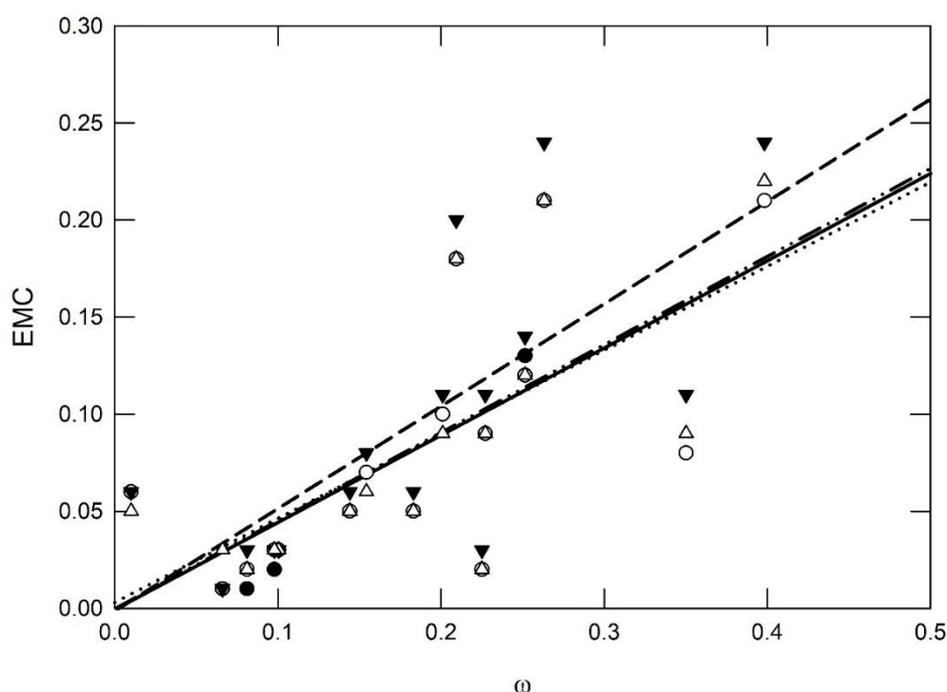
Las cuatro EdE presentan en promedio una sobrepredicción del segundo coeficiente virial; sin embargo, para el CO, CO<sub>2</sub>, C<sub>1</sub> y C<sub>2</sub>, la EdE PR presenta una subpredicción.

Otro estadístico importante es el Error Medio Cuadrático (EMC)

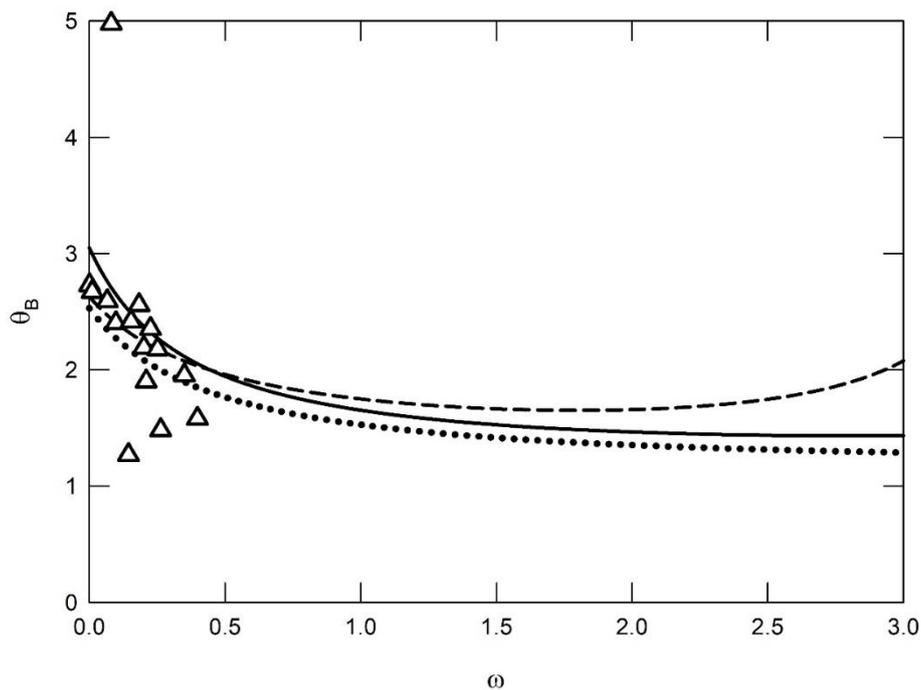
$$EMC = \sqrt{\frac{1}{npts} \sum_{i=1}^{npts} (\hat{B}_i^{cal} - \hat{B}_i^{exp})^2} \quad (25)$$

En la Fig. 1 se presentan los valores del  $EMC$  en función del factor acéntrico, es posible observar una tendencia creciente, siendo la EdE SRK la que muestra una velocidad de crecimiento mayor. Esto es un indicador de que conforme la molécula se aleja del modelo de molécula esférica, las predicciones de las cuatro EdE son menos precisas.

Los valores de la temperatura de Boyle reducida para las sustancias puras estudiadas en este trabajo, se obtuvieron encontrando la raíz del polinomio recomendado para el segundo coeficiente virial (Dymond et al., 2002). La comparación con las predicciones de las EdE PR, SRK y ER1 se muestran en la Fig. 2. Con la finalidad de observar la capacidad predictiva de la EdE, se usaron valores del factor acéntrico entre cero y tres. Es posible observar que las EdE PR y SRK tienen una tendencia decreciente y posteriormente se comportan de forma asintótica en  $\theta_B = 1.29$  para SRK y  $\theta_B = 1.43$  para PR.



**Figura 1.** Error Medio Cuadrático ( $EMC$ ) como función del factor acéntrico ( $w$ ) para las EdE:  $\triangle$  PR;  $\blacktriangledown$  SRK;  $\bullet$  ER1 y  $\circ$  ER2. Se muestran las líneas de regresión para:  $\cdots$  PR;  $-\cdot-$  SRK;  $—$  ER1 y  $-\cdot-$  ER2.



**Figura 2.** Determinación de la dependencia de la temperatura de Boyle con el factor acéntrico.  $\Delta$  Valores obtenidos de las correlaciones recomendadas. Valores calculados con las EdE cúbicas: — PR; .... SRK; - - ER.

Para la EdE ER, sólo se utilizó la forma con el factor de compresibilidad empírico independiente de la temperatura, puesto que la temperatura de Boyle se encuentra por encima del punto crítico; los resultados muestran que para esta EdE la temperatura de Boyle tiene un valor mínimo ( $\theta_B = 1.65$ ) para un factor acéntrico de 1.80. Este comportamiento se debe a que para la EdE ER  $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$  y  $\alpha$  son funciones del factor acéntrico, a diferencia de las EdE PR y SRK, en las que  $\Omega_a$  y  $\Omega_b$  son valores constantes.

#### 4. CONCLUSIÓN

Se empleó una ecuación de estado cúbica con tres parámetros para calcular el segundo coeficiente virial y la temperatura de Boyle para diversas sustancias, entre ellas hidrocarburos usados frecuentemente en la industria del gas natural y el petróleo. Se encontró que las predicciones para estas propiedades termodinámicas con la EdE ER se aproximan a las obtenidas con las EdE cúbicas usadas tradicionalmente, como PR o SRK. Para las tres EdE utilizadas en este trabajo, se encontró que el sesgo y el error absoluto medio son directamente proporcionales al factor acéntrico, lo que significa que cuando las moléculas se alejan del modelo de esfera las ecuaciones de estado predicen

estas propiedades con menor precisión. La EdE ER resulta ser una alternativa a las EdE tradicionales, y en la actualidad, con las capacidades de cómputo disponibles en el mercado, el uso de EdE más complejas proporciona una alternativa para la simulación de procesos químicos y petroquímicos.

## 5. LISTA DE REFERENCIAS

- Akhouri, B. P., & Kaur, S. (2019). Joule-Thomson coefficients and inversion curves from newly developed cubic equations of state. *European Journal of Chemistry*, 10(3), 244–255. <https://doi.org/10.5155/eurjchem.10.3.244-255.1883>
- Bonyadi, M., & Esmailzadeh, F. (2008). A modification of the alpha function ( $\alpha$ ), and the critical compressibility factor ( $\zeta_c$ ) in ER (Esmailzadeh-Roshanfekar) equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, 273(1–2), 31–37. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2008.08.003>
- Dymond, J. H., Marsh, K. N., Wilhoit, R. C., & Wong, K. C. (2002). *Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures Virial Coefficients of Pure Gases* (Vol. 21; M. Frenkel & K. N. Marsh, Eds.).
- Ejraei Bakyani, A., Taghizadeh, A., Nematollahi Sarvestani, A., Esmailzadeh, F., & Mowla, D. (2018). Three-dimensional and two-phase numerical simulation of fractured dry gas reservoirs. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, 8(4), 1425–1441. <https://doi.org/10.1007/s13202-017-0423-2>
- Eslamimanesh, A., & Esmailzadeh, F. (2010). Estimation of solubility parameter by the modified ER equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, 291(2), 141–150. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2009.12.031>
- Esmailzadeh, F., & Roshanfekar, M. (2006). A new cubic equation of state for reservoir fluids. *Fluid Phase Equilibria*, 239(1), 83–90. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2005.10.013>
- Esmailzadeh, F., & Samadi, F. (2008). Modification of Esmailzadeh-Roshanfekar equation of state to improve volumetric predictions of gas condensate reservoir. *Fluid Phase Equilibria*, 267(2), 113–118. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2008.02.017>
- Farzi, R., & Esmailzadeh, F. (2016a). Prediction of densities of pure ionic liquids using Esmailzadeh-Roshanfekar equation of state and critical properties from group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 423, 101–108.

- <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2016.04.020>
- Farzi, R., & Esmailzadeh, F. (2016b). Prediction of surface tension of pure hydrocarbons using Esmailzadeh-Roshanfekr equation of state and group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 427, 353–361. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2016.07.029>
- Khan, S. H., Kumari, A., Dixit, G., Majumder, C. B., & Arora, A. (2020). Thermodynamic modeling and correlations of CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, and N<sub>2</sub> hydrates with cage occupancies. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, 10(8), 3689–3709. <https://doi.org/10.1007/s13202-020-00998-y>
- Mamedov, B. A., & Somuncu, E. (2020). Boyle temperature and boyle volume of refrigeration gases. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(3), 601–604. <https://doi.org/10.2514/1.T5944>
- Nath, J. (1982). Acentric Factor and the Critical Volumes for Normal Fluids. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 21(3), 325–326. <https://doi.org/10.1021/i100006a016>
- Nourbakhsh, H., Yazdizadeh, M., & Esmailzadeh, F. (2011). Prediction of asphaltene precipitation by the extended Flory-Huggins model using the modified Esmailzadeh-Roshanfekr equation of state. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 80(1), 61–68. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2011.10.007>
- Peng, D.-Y., & Robinson, D. B. (1976). A New Two-Constant Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1), 59–64. <https://doi.org/10.1021/ba-1979-0182.ch009>
- Redlich, O., & Kwong, J. N. S. (1949). On the thermodynamics of solutions. V An equation of state. fugacities of gaseous solutions. *Chemical Reviews*, 44(1), 233–244. [https://doi.org/10.1142/9789814295123\\_0013](https://doi.org/10.1142/9789814295123_0013)
- Soave, G. (1972). Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. *Chemical Engineering Science*, 27(6), 1197–1203. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4)
- Soto, O. F., & Mosquera López, S. (2018). Del Ferro, Tartaglia, Cardano y la solución de la ecuación cúbica. *Sigma*, 14(2), 14–24.
- Talaghat, M. R. (2009). Effect of various types of equations of state for prediction of

simple gas hydrate formation with or without the presence of kinetic inhibitors in a flow mini-loop apparatus. *Fluid Phase Equilibria*, 286(1), 33–42. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2009.08.003>

Van der Waals, J. D. (1873). *Over de Continuïteit van den Gas-en Vloeistoestand (on the continuity of the gas and liquid state)*. Universiteit Leiden, Leiden, The Netherlands.

Yaws, C. L., & Narasimhan, P. K. (2009a). Critical properties and acentric factor—Inorganic compounds. In *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons* (pp. 96–105). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-081551596-8.50007-9>

Yaws, C. L., & Narasimhan, P. K. (2009b). Critical properties and acentric factor—Organic compounds. In *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons* (pp. 1–95). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-081551596-8.50006-7>