

Marcelo Castier

Dr.	
Nombre en citaciones bibliográficas:	Sexo: Masculino
Nacido el 21-11-1957 en Rio de Janeiro, Brasil. De nacionalidad Brasil.	

Información de Contacto

Áreas de Actuación

- 1 Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , Procesos de separación
- 2 Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , Termodinámica
- 3 Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, Seguridad de procesos químicos

Formación Académica/Titulación

1985-1988	Doctorado - Department of Chemical Engineering Technical University of Denmark, Dinamarca Título: Flowsheet Simulation and Chemical and Phase Equilibria, Año de Obtención: 1988 Tutor: Aage Fredenslund y Peter Rasmussen Becario de: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, Brasil Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , Simulación de procesos químicos;
1981-1985	Maestría - COPPE - Programa de Engenharia Química Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil Título: Um Programa Executivo para a Simulação de Processos Químicos, Año de Obtención: 1985 Tutor: Krishnaswamy Rajagopal Becario de: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, Brasil Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, Simulación de procesos químicos;
1976-1980	Grado - Engenharia Química Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil, Año de Obtención: 1981 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;

Formación Complementaria

2014-2014	Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: Pursuing ABET Accreditation Horas totales: 4 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Otras Ingenierías y Tecnologías, Otras Ingenierías y Tecnologías, ;
2014-2014	Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: Communicating like an Engineering Leader Horas totales: 4 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Otras Ingenierías y Tecnologías, Otras Ingenierías y Tecnologías, ;
2014-2014	Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: Writing Effective PSAs (Project Safety Analyses) Horas totales: 8 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
2014-2014	Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: Fundamentals of Safety Management Horas totales: 8 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
2013-2013	Cursos de corta duración Accreditation Board for Engineering and Technology, Estados Unidos Título: Institute for the Development of Excellence in Assessment Leadership (IDEAL) Horas totales: 40 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Otras Ingenierías y Tecnologías, Otras Ingenierías y Tecnologías, ;
2012-2012	Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: ABET Program Assessment Basic Workshop Horas totales: 3

2012-2012	Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Otras Ingenierías y Tecnologías, Otras Ingenierías y Tecnologías, ; Cursos de corta duración Texas A&M University at Qatar, Qatar Título: Workshop on ABET Self Study Report Horas totales: 3
1992-1992	Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Otras Ingenierías y Tecnologías, Otras Ingenierías y Tecnologías, ; Cursos de corta duración Laboratório Nacional de Computação Científica, Brasil Título: Primeira Escola de Computacao de Alto Desempenho Horas totales: 40
1989-1989	Áreas de Conocimiento: Ciencias Naturales, Ciencias de la Computación e Información, Ciencias de la Computación, ; Cursos de corta duración Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Brasil Título: Primeira Escola Brasileira de Computacao Algebrica Horas totales: 40
1988-1988	Áreas de Conocimiento: Ciencias Naturales, Matemáticas, Matemática Aplicada, ; Cursos de corta duración Gesellschaft für Biotechnologische Forschung, Alemania Título: Introduction to Industrial Biotechnology Horas totales: 200
1986-1986	Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Biotecnología Industrial, Bioprosesamiento Tecnológico, Biocatálisis, Fermentación, ; Cursos de corta duración Massachusetts Institute of Technology, Estados Unidos Título: New Developments in Modeling, Simulation, and Optimization of Chemical Processes Horas totales: 60 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, Simulación de procesos químicos;

Institución principal donde desarrolla sus actividades

Texas A&M University at Qatar - TAMUQ

Actuación Profesional

Texas A&M University at Qatar - TAMUQ

Vínculos con la Institución

2017 - Actual	Adjunct Professor of Chemical Engineering	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	
2010 - 2017	Professor of Chemical Engineering	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	

United Arab Emirates University - UAEU

Vínculos con la Institución

2006 - 2010	Associate Professor of Chemical Engineering	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	

Universidad de Vigo - UVigo

Vínculos con la Institución

1999 - 1999	Profesor visitante	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

Vínculos con la Institución

1988 - 2006	Profesor adjunto	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	

University of Delaware - U.D.

Vínculos con la Institución

2006 - 2006	Investigador visitante senior	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	
	Otras Informaciones: Becario da Fulbright Foundation: Senior Visiting Scholar	

1996 - 1997	Investigador visitante	C. Horaria: 40
	Régimen: Dedicación total	

University of Queensland - U.QUEENSLAND

Vínculos con la Institución

1996 - 1996 **Investigador visitante**
Régimen: Dedicación total

C. Horaria: 40

Significado de su trabajo en el contexto de los principales problemas planteados en su área:

(3915 citaciones, H-index 33. Fuente: Google Scholar, 30 de junio de 2025).

Producción Técnica

Producción Bibliográfica

Artículos publicados en revistas científicas

Artículos completos publicados en revistas arbitradas

- 1 ; Schaerer, C.E.; Cubilla, I.; Cáceres, M.; (RELEVANTE) Density gradients in aqueous salt solutions: a challenging calculation for electrolyte equations of state, *Fluid Phase Equilibria*, v. 592, p. 114327, 2025.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, Termodinámica;
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 2 ; Novak, N.; Economou, I.G.; Yang, F.; Olsen, M.D.; Liang, X.; von Solms, N.; de Hemptinne, J.-C.; Panagiotopoulos, A.; Kontogeorgis, G.; (RELEVANTE) Contributions to ionic activity coefficients: A review and comparison of equations of state with molecular simulations, *Fluid Phase Equilibria*, v. 594, p. 114339, 2025.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 3 ; Vechot, L.N.; Grati, A.; (RELEVANTE) Analysis of the behavior of a gas-generating system under runaway conditions in a closed vessel, *Process Safety and Environmental Protection*, v. 191, p. 2178-2190, 2024.
ISSN/ISBN: 0957-5820
- 4 ; de Barros Barreto, P.; Thiessen-Anttila, A.; (RELEVANTE) Simulating the effect of rainwater harvesting on flood mitigation: the case of Asunción, Paraguay, *Natural hazards (Dordrecht)*, 2024.
ISSN/ISBN: 0921-030X
- 5 ; Franco, L.F.M.; Tavares, F.W.; Barreto Jr., A.; Gonçalves, A.F.; Sermoud, V.M.; (RELEVANTE) Classical density functional theory of confined fluids: from getting started to modern applications, *Fluid Phase Equilibria*, v. 586, p. 114177, 2024.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 6 ; Franco, L.F.M.; Gonçalves, A.F.; Amancio, R.J.; (RELEVANTE) Classical Density Functional Theory Consistent with the SAFT-VR Mie Equation of State: Development of Functionals and Application to Confined Fluids, *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 69, p. 3645-3659, 2024.
ISSN/ISBN: 0021-9568
- 7 ; Economou, I.G.; Novak, N.; Kontogeorgis, G.; (RELEVANTE) Theoretical considerations on single and mixed solvent electrolyte solutions, *Fluid Phase Equilibria*, v. 576, p. 113924, 2024.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 8 ; Cuppens, A.; Alfonso-Villalba, J.; (RELEVANTE) Energy use for tulip cultivation in a subtropical zone, *Energy Nexus*, v. 11, p. 100236, 2023.
ISSN/ISBN: 2772-4271
- 9 ; de Barros Barreto, P.; (RELEVANTE) Economic attractiveness of domestic rainwater harvesting in Brazilian cities, *Discover Water*, v. 3, p. 9, 2023.
ISSN/ISBN: 2730-647X
- 10 ; Economou, I.G.; Kontogeorgis, G.; Novak, N.; (RELEVANTE) Mixed solvent electrolyte solutions: a review and calculations with eSAFT-VR Mie Equation of State, *Industrial & Engineering Chemical Research*, v. 62, p. 13646-13665, 2023.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 11 ; Franco, L.F.M.; Gonçalves, A.F.; (RELEVANTE) Capillary condensation: limitations of the Multicomponent Potential Theory of Adsorption ({MPTA}), *Fluid Phase Equilibria*, v. 569, p. 113759, 2023.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 12 ; Franco, L.F.M.; Gonçalves, A.F.; (RELEVANTE) Adsorption in a centrifugal field: a thermodynamic analysis, *Fluid Phase Equilibria*, v. 572, p. 113820, 2023.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 13 ; Toro, E.M.; (RELEVANTE) Planning and picking in small warehouses under industry-relevant constraints, *Production Engineering Research and Development*, v. 17 f: 3-4, p. 575-590, 2023.
ISSN/ISBN: 0944-6524
- 14 ; Obode, E.; Abdel-Wahab, A.; (RELEVANTE) Techno-Economic Analysis Towards Full-Scale Pressure Retarded Osmosis Plants, *Energies*, v. 16, p. 325, 2023.
ISSN/ISBN: 1996-1073
- 15 ; Novak, N.; Economou, I.G.; Kontogeorgis, G.; (RELEVANTE) Extension of the eSAFT-VR Mie Equation of State from aqueous to non-aqueous electrolyte solutions, *Fluid Phase Equilibria*, v. 565, p. 113618, 2023.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 16 ; de Barros Barreto, P.; Ortiz, S.; (RELEVANTE) Rainwater harvesting for domestic applications: The case of Asunción, Paraguay, *Results in Engineering (RINENG)*, v. 16, p. 100638, 2022.
ISSN/ISBN: 2590-1230

- 17 ; Economou, I.G.; Franco, L.F.M.; Santos, M.S.; (RELEVANTE) Molecular understanding of enhanced hydrocarbon recovery processes: role of local self-diffusion coefficients of complex mixtures, *Energy & fuels (Print)*, v. 36, p. 8301-8310, 2022.
ISSN/ISBN: 0887-0624
- 18 ; Franco, L.F.M.; Gonçalves, A.F.; The role of cross-association between carbon dioxide and hydrogen sulfide using the SAFT-VR Mie equation of state, *Fluid Phase Equilibria*, v. 559, p. 113493, 2022.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 19 ; Cabral, V.F.; Silva, N.; Bacicheti, J.M.O.; Campana, L.; Rossoni, D.; (RELEVANTE) Calculation of Water Activity in Electrolytic Solutions Using the Electrolattice and Q-Electrolattice Equations of State, *Fluid Phase Equilibria*, v. 563, p. 113569, 2022.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 20 ; Abdel-Wahab, A.; Selam, M.A.; Manzoor, H.; Adham, S.; Shon, H.K.; Matta, S.M.; (RELEVANTE) Predicting the performance of spiral-wound membranes in pressure-retarded osmosis processes, *Renewable Energy*, v. 189, p. 66-77, 2022.
ISSN/ISBN: 0960-1481
- 21 ; Novak, N.; Economou, I.G.; Kontogeorgis, G.; Modeling of gas solubility in aqueous electrolyte solutions with SAFT-VR Mie Equation of State, *Industrial & Engineering Chemical Research*, v. 60, p. 15327-15342, 2021.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 22 ; Novak, N.; Economou, I.G.; Kontogeorgis, G.; (RELEVANTE) Water - hydrocarbon phase equilibria with SAFT-VR Mie equation of state, *Industrial & Engineering Chemical Research*, v. 60, p. 5278-5299, 2021.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 23 ; Selam, M.A.; Rahman, F.B.A.; Manzoor, H.; Adham, S.; Abdel-Wahab, A.; (RELEVANTE) A tool for assessing the scalability of pressure-retarded osmosis (PRO) membranes, *Renewable Energy*, v. 149, p. 987-999, 2020.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
ISSN/ISBN: 0960-1481
Palabras Clave: equilibrio entre fases; propiedades termodinámicas;
- 24 ; Jawad, J.; Vechot, L.N.; Soares, R.P.; (RELEVANTE) Dynamics of Gas Flow Between Interconnected Vessels: Experiments and Simulations, *Process Safety and Environmental Protection*, v. 134, p. 381-391, 2020.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
ISSN/ISBN: 0957-5820
Palabras Clave: seguridad; procesos químicos; simulación;
- 25 ; Manzoor, H.; Selam, M.A.; Abdel-Wahab, A.; Adham, S.; Shon, H.K.; (RELEVANTE) Energy recovery modeling of pressure-retarded osmosis systems with membrane modules compatible with high salinity draw streams, *Desalination*, v. 493, p. 114624, 2020.
ISSN/ISBN: 0011-9164
- 26 ; Franco, L.F.M.; Economou, I.G.; AlYazidi, A.; (RELEVANTE) Modeling confined fluids with the multicomponent potential theory of adsorption and the SAFT-VR Mie equation of state, *Fluid Phase Equilibria*, v. 534, p. 112941, 2020.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 27 ; Barbosa, G.D.; Travalloni, L.; Tavares, F.W.; (RELEVANTE) Adsorption of Gases in Zeolitic Imidazolate Frameworks: Modeling with Equations of State for Confined Fluids, *Industrial & Engineering Chemical Research*, v. 58, p. 19702-19708, 2019.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 0888-5885
Palabras Clave: zif; mof; termodinámica; ecuaciones de estado;
- 28 ; Alnoush, W.; (RELEVANTE) Shortcut modeling of natural gas supersonic separation, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 65, p. 284-300, 2019.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
ISSN/ISBN: 1875-5100
Palabras Clave: supersonic; separators; natural gas; hidrocarburos;
- 29 ; Machado, G.D.; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; Voll, A.P.; (RELEVANTE) Ethanol and Methanol UNIFAC Subgroup Parameter Estimation in the Prediction of the Liquid-Liquid Equilibrium of Biodiesel Systems, *Fluid Phase Equilibria*, v. 488, p. 79-86, 2019.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 0378-3812
Palabras Clave: termodinámica; biodiesel; equilibrio entre fases;
- 30 ; Barbosa, G.D.; Travalloni, L.; Tavares, F.W.; (RELEVANTE) Pore size distributions from extended Peng-Robinson equations of state for fluids confined in cylindrical and slit pores, *Fluid Phase Equilibria*, v. 493, p. 67-77, 2019.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 31 ; Economou, I.G.; Santos, M.S.; (RELEVANTE) Molecular dynamics simulations of electrolyte solutions confined by calcite mesopores, *Fluid Phase Equilibria*, v. 487, p. 24-32, 2019.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 0378-3812

- Palabras Clave: dinamica molecular; electrolitos; calcita; poros; mesoporos;
- 32 ; Mattedi, S.; Hoffmann, D.; Paredes, M.L.L.; (RELEVANTE) Liquid phase density, sound speed, and vapor pressure of linear alkanes using the Mattedi-Tavares-Castier equation of state, Industrial & Engineering Chemical Research, v. 58, p. 6767-6777, 2019.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , Termodinámica;
 ISSN/ISBN: 0888-5885
- 33 ; Economou, I.G.; Krokidas, P.; Moncho, S.; Brothers, E.N.; Jeong, H.-K.; (RELEVANTE) On the efficient separation of gas mixtures with the mixed linker zeolitic-imidazolate framework-7-8, ACS Applied Materials & Interfaces, v. 10, p. 39631-39644, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 1944-8244
 Palabras Clave: zif; mof; dinamica molecular; simulación molecular;
- 34 ; Krokidas, P.; Moncho, S.; Brothers, E.N.; Economou, I.G.; (RELEVANTE) Tailoring the gas separation efficiency of metal organic framework ZIF-8 through metal substitution: a computational study, Physical Chemistry Chemical Physics, v. 20, p. 4879-4892, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 1463-9076
 Palabras Clave: zif-8; mof; separación; gases;
- 35 ; Barbosa, G.D.; Travalloni, L.; Tavares, F.W.; D'Lima, M.L.; Daghash, S.M.H.; (RELEVANTE) Cubic equations of state extended to confined fluids: new mixing rules and extension to spherical pores, Chemical Engineering Science, v. 184, p. 52-61, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0009-2509
 Palabras Clave: ecuaciones de estado; fluidos confinados;
- 36 ; Selam, M.A.; Economou, I.G.; (RELEVANTE) Thermodynamic properties of aqueous solutions of strongly dissociating salts with the eSAFT-VR Mie equation of state, Fluid Phase Equilibria, v. 464, p. 47-63, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0378-3812
 Palabras Clave: ecuaciones de estado; electrolitos;
- 37 ; Santos, M.S.; Economou, I.G.; Franco, L.F.M.; (RELEVANTE) Molecular dynamics simulation of n-alkanes and CO2 confined by calcite nanopores, Energy & fuels (Print), v. 32, p. 1934-1941, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0887-0624
- 38 ; Vechot, L.N.; Saha, N.; Al-Muhannadi, R.; Al-Mohannadi, A.; (RELEVANTE) Is it the time to say bye to the phi-factor?, Process Safety and Environmental Protection, v. 113, p. 193-203, 2018.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
 ISSN/ISBN: 0957-5820
 Palabras Clave: seguridad; procesos; calorimetría;
- 39 ; Economou, I.G.; Franco, L.F.M.; (RELEVANTE) A statistical mechanical model for adsorption coupled with SAFT-VR Mie equation of state, Langmuir, v. 33, p. 11291-11298, 2017.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0743-7463
 Palabras Clave: ecuaciones de estado; termodinámica;
- 40 ; Franco, L.F.M.; Economou, I.G.; (RELEVANTE) Two-body perturbation theory versus first order perturbation theory: a comparison based on the square-well fluid, Journal of Chemical Physics, v. 147, p. 214108, 2017.**
 Áreas de Conocimiento: Ciencias Naturales, Ciencias Químicas, Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica, ;
 ISSN/ISBN: 0021-9606
- 41 ; Basha, A.; Kanes, R.; Vechot, L.N.; (RELEVANTE) Discharge of Non-reactive Fluids from Vessels, Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 34, p. 1149-1159, 2017.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0104-6632
 Palabras Clave: seguridad; procesos;
- 42 ; Krokidas, P.; Economou, I.G.; (RELEVANTE) Computational Study of ZIF-8 and ZIF-67 Performance for Separation of Gas Mixtures, Journal of Physical Chemistry C, v. 121, p. 17999-18011, 2017.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 1932-7447
 Palabras Clave: separación; gases; zif; mof;
- 43 ; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; Voll, F.A.P.; Ferreira-Pinto, L.; Zanette, A.; (RELEVANTE) Vapor-liquid Equilibrium of Carbon dioxide + Ethyl Acetate + Oleic Acid Mixtures at High Pressures, Journal of Chemical and Engineering Data, v. 62, p. 2855-2860, 2017.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0021-9568

- Palabras Clave: equilibrio entre fases;
- 44 ; Franco, L.F.M.; Economou, I.G.; **(RELEVANTE) Diffusion in homogeneous and in inhomogeneous media: a new unified approach, Journal of Chemical Theory and Computation, v. 12, p. 5247-5255, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 1549-9618
 Palabras Clave: difusión; fluidos;
- 45 ; Franco, L.F.M.; Economou, I.G.; **(RELEVANTE) Anisotropic parallel self-diffusion coefficients near the calcite surface: a molecular dynamics study, Journal of Chemical Physics, v. 145, p. 0847021-0847027, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0021-9606
 Palabras Clave: difusión; fluidos;
- 46 **(RELEVANTE) Effect of side streams on supersonic gas separations, Journal of Natural Gas Science and Engineering, v. 35, p. 299-308, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
 ISSN/ISBN: 1875-5100
 Palabras Clave: seguridad; procesos;
- 47 ; Mattedi, S.; Zuber, A.; Santos, D.; Lourenco, E.; Santos, M.F.C.; Franceschi, E.; Dariva, C.; Barison, A.; **(RELEVANTE) Volumetric properties of binary aqueous solutions of protic ionic liquids based on bis (2-hydroxyethyl) ammonium, Journal of Molecular Liquids, v. 222, p. 867-872, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0167-7322
 Palabras Clave: líquidos iónicos;
- 48 ; Economou, I.G.; Kenneth R. Hall: **A Distinguished Educator, Scientist, and {University} Administrator, Journal of Chemical and Engineering Data, v. 61, p. 2649-2650, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0021-9568
- 49 ; D'Lima, M.L.; Economou, I.G.; Dawass, N.; **(RELEVANTE) Phase equilibrium with external fields: application to confined fluids, Journal of Chemical and Engineering Data, v. 61, p. 2873-2885, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0021-9568
 Palabras Clave: ecuaciones de estado; fluidos confinados;
- 50 ; Barbosa, G.D.; Travalloni, L.; Tavares, F.W.; **(RELEVANTE) Extending an equation of state to confined fluids with basis on molecular simulations, Chemical Engineering Science, v. 153, p. 212-220, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0009-2509
 Palabras Clave: ecuaciones de estado;
- 51 ; Othman, E.; Atilhan, M.; Aparicio, S.; Tohidi, B.; Tariq, M.; Khraisheh, M.; García, G.; **(RELEVANTE) Experimental and DFT Approach on the Determination of Natural Gas Hydrate Equilibrium with the use of Excess N2 and Choline-Chloride Ionic Liquid as an Inhibitor, Energy & fuels (Print), v. 30, p. 2821-2832, 2016.**
 ISSN/ISBN: 0887-0624
- 52 **(RELEVANTE) ZIF-67 framework: a promising new candidate for propylene/propane separations - Experimental data and molecular simulations, Journal of Physical Chemistry C, v. 120, p. 8116-8124, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ciencias Naturales, Ciencias Químicas, Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica, ;
 ISSN/ISBN: 1932-7447
- 53 ; Machado, G.D.; Aranda, D.A.G.; Pessoa, F.L.P.; Cardozo-Filho, L.; Cabral, V.F.; Souza, T.L.; **(RELEVANTE) Computer simulation of biodiesel production by hydro-esterification, Chemical Engineering and Processing, v. 103, p. 37-45, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0255-2701
 Palabras Clave: biodiesel; simulación;
- 54 ; Vechot, L.N.; Kanes, R.; **(RELEVANTE) Flash calculations with specified entropy and stagnation enthalpy, Fluid Phase Equilibria, v. 408, p. 196-204, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0378-3812
 Palabras Clave: seguridad; procesos;
- 55 ; Vechot, L.N.; Basha, A.; Kanes, R.; **(RELEVANTE) Simulation of Venting and Leaks from Pressure Vessels, Journal of Loss Prevention in the Process Industries, v. 40, p. 563-577, 2016.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería de Procesos Químicos, ;
 ISSN/ISBN: 0950-4230
 Palabras Clave: seguridad; procesos;
- 56 ; Zuber, A.; Checoni, R.F.; **(RELEVANTE) Thermodynamic Properties of Nonaqueous Single Salt Solutions Using the Q-Electrolattice Equation of State, Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 32, p. 637-646, 2015.**
 Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química , ;
 ISSN/ISBN: 0104-6632

- Palabras Clave: electrolitos; termodinamica;
- 57 ; Krokidas, P.; Economou, I.G.; Moncho, S.; Brothers, E.N.; **Molecular Simulation Studies of the Diffusion of Methane, Ethane, Propane and Propylene in ZIF-8, Journal of Physical Chemistry C**, v. 119, p. 27028-27037, 2015.
Áreas de Conocimiento: Ciencias Naturales, Ciencias Químicas, Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica, ;
ISSN/ISBN: 1932-7447
- Palabras Clave: zif-8; zif; mof; dinamica molecular;
- 58 (RELEVANTE) **Helmholtz function-based global phase stability test and its link to the isothermal-isochoric flash problem, Fluid Phase Equilibria**, v. 379, p. 104-111, 2014.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 59 (RELEVANTE) **Modeling and simulation of supersonic gas separations, Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 18, p. 304-311, 2014.
Áreas de Conocimiento: Ingeniería y Tecnología, Ingeniería Química, Ingeniería Química, ;
ISSN/ISBN: 1875-5100
- Palabras Clave: separación; gases;
- 60 ; Zuber, A.; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; Checoni, R.F.; (RELEVANTE) **An empirical equation for the dielectric constant in aqueous and nonaqueous electrolyte mixtures, Fluid Phase Equilibria**, v. 376, p. 116-123, 2014.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 61 ; Zuber, A.; Checoni, R.F.; (RELEVANTE) **Thermodynamic properties of aqueous solutions of single and multiple salts using the Q-electrolattice equation of state, Fluid Phase Equilibria**, v. 362, p. 268-280, 2014.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 62 ; Checoni, R.F.; Zuber, A.; (RELEVANTE) **Fitting equation of state parameters in parallel computers, Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 31 f: 4, p. 993-1002, 2014.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 63 (RELEVANTE) **Phase behavior of UAE crude-oil/carbon dioxide system at reservoir temperature, International Journal of Modern Sciences and Engineering Technology**, v. 1 f: 4, p. 96-104, 2014.
ISSN/ISBN: 2349-3755
- 64 ; Travalloni, L.; Tavares, F.W.; (RELEVANTE) **Phase equilibrium of fluids confined in porous media from an extended Peng-Robinson equation of state, Fluid Phase Equilibria**, v. 362, p. 335-341, 2014.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 65 ; Zanette, A.; Zuber, A.; Cardozo-Filho, L.; Cabral, V.F.; Ferreira-Pinto, L.; W. M. Giufrida; A. C. Feirhmann; (RELEVANTE) **Vapor-liquid equilibrium data for carbon dioxide plus (r,s)- 1,2-isopropylidene glycerol (solketal) plus oleic acid systems at high pressure, Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 59 f: 5, p. 1494-1498, 2014.
ISSN/ISBN: 0021-9568
- 66 ; Vechot, L.N.; T. Olewski; S. Mannan; O. Basha; Y. Liu; (RELEVANTE) **Modelling of LNG pool spreading on land with included vapour-liquid equilibrium and different boiling regimes, Chemical Engineering Transactions**, v. 31, p. 43-48, 2013.
ISSN/ISBN: 1974-9791
- 67 ; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; Ferreira-Pinto, L.; Voll, F.A.P.; M.O. Ferreira; E.M.B.D. Souza; (RELEVANTE) **Experimental vapor-liquid equilibria for the systems 2-Ethyl-1-hexanol + Glycerol + CO₂ and 2-Methyl-2-propanol + Glycerol + CO₂, Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 58 f: 9, p. 2506-2512, 2013.
ISSN/ISBN: 0021-9568
- 68 ; Machado, G.D.; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; Pessoa, F.L.P.; Aranda, D.A.G.; (RELEVANTE) **Biodiesel production by esterification of hydrolyzed soybean oil with ethanol in reactive distillation columns: Simulation studies, Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52 f: 27, p. 9461-9469, 2013.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 69 ; Zuber, A.; Checoni, R.F.; Tavares, F.W.; J.P.L. Santos; R. Matthew; (RELEVANTE) **Thermodynamic properties of 1:1 salt aqueous solutions with the electrolattice equation of state, Oil & Gas Science and Technology-Revue D'IFP Energies Nouvelles**, v. 68 f: 2, p. 255-270, 2013.
ISSN/ISBN: 1953-8189
- 70 (RELEVANTE) **Rigorous multiple utility targeting in heat exchanger networks, Energy Conversion and Management**, v. 59, p. 74-85, 2012.
ISSN/ISBN: 0196-8904
- 71 ; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) **Pure saturated gases with predicted negative fundamental derivative of gas dynamics, Fluid Phase Equilibria**, v. 334, p. 128-136, 2012.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 72 ; F.H. Al-Masabi; (RELEVANTE) **Simulation of carbon dioxide recovery from flue gases in aqueous 2-amino-2-methyl-1-propanol solutions, International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 5 f: 6, p. 1478-1488, 2011.
ISSN/ISBN: 1878-0148
- 73 (RELEVANTE) **Saturation points of specified entropy, Fluid Phase Equilibria**, v. 301 f: 1, p. 105-109, 2011.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 74 (RELEVANTE) **Thermodynamic speed of sound in multiphase systems, Fluid Phase Equilibria**, v. 306 f: 2, p. 204-211, 2011.
ISSN/ISBN: 0378-3812

- 75 ; M. Amer; (RELEVANTE) XSEOS: an evolving teaching tool for chemical engineering thermodynamics, Education for Chemical Engineers, v. 6, p. e62-e70, 2011.
ISSN/ISBN: 1749-7728
- 76 ; Aranda, D.A.G.; Machado, G.D.; Cabral, V.F.; Cardozo-Filho, L.; (RELEVANTE) Computer simulation of fatty acid esterification in reactive distillation columns, Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 50 f: 17, p. 10176-10181, 2011.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 77 ; Tavares, F.W.; J.P.L. Santos; (RELEVANTE) Vapor-liquid equilibrium calculations of aqueous and nonaqueous binary systems using the Mattedi-Tavares-Castier equation of st, Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 50 f: 1, p. 102-110, 2011.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 78 ; P.S.O. Beltrao; M.J.E.M. Cardoso; (RELEVANTE) A reliable procedure to predict salt precipitation in pure phases, Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 27 f: 1, p. 195-208, 2010.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 79 Dynamic simulation of fluids in vessels via entropy maximization, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, v. 16 f: 1, p. 122-129, 2010.
ISSN/ISBN: 1226-086X
- 80 ; Tavares, F.W.; J.P.L. Santos; (RELEVANTE) Vapor-liquid equilibrium calculations for refrigerant mixtures with the Mattedi-Tavares-Castier EOS, Fluid Phase Equilibria, v. 296 f: 2, p. 133-139, 2010.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 81 ; Tavares, F.W.; Travalloni, L.; S.I. Sandler; (RELEVANTE) Critical behavior of pure confined fluids from an extension of the van der Waals equation of state, Journal of Supercritical Fluids, v. 55 f: 2, p. 455-461, 2010.
ISSN/ISBN: 0896-8446
- 82 ; S.I. Sandler; Tavares, F.W.; Travalloni, L.; (RELEVANTE) Thermodynamic modeling of confined fluids using an extension of the generalized van der Waals theory, Chemical Engineering Science, v. 65 f: 10, p. 3088-3099, 2010.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 83 (RELEVANTE) Solution of the isochoric-isoenergetic flash problem by direct entropy maximization, Fluid Phase Equilibria, v. 276 f: 1, p. 7-17, 2009.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 84 (RELEVANTE) XSEOS: an open software for chemical engineering thermodynamics, Chemical Engineering Education, v. 42 f: 2, p. 74-81, 2008.
ISSN/ISBN: 0009-2479
- 85 ; E.R.A. Lima; E.C. Biscia Jr.; (RELEVANTE) Differential-algebraic approach to dynamic simulations of flash drums with rigorous evaluation of physical properties, Oil & Gas Science and Technology-Revue D'IFP Energies Nouvelles, v. 63 f: 5, p. 677-686, 2008.
ISSN/ISBN: 1953-8189
- 86 ; M.F. Alfradique; R.S. Macedo; (RELEVANTE) Automatic generation of matlab functions using Mathematica and Thermath, Computing in Science & Engineering,, v. 10 f: 4, p. 41-49, 2008.
ISSN/ISBN: 1521-9615
- 87 ; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Calculation of phase equilibrium of natural gases with the Peng-Robinson and PC-SAFT equations of state, Oil & Gas Science and Technology-Revue D'IFP Energies Nouvelles, v. 62 f: 5, p. 707-714, 2007.
ISSN/ISBN: 1953-8189
- 88 ; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Critical points of hydrocarbon mixtures with the Peng- Robinson, SAFT, and PC-SAFT equations of state, Fluid Phase Equilibria, v. 257 f: 1, p. 78-101, 2007.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 89 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) Adsorption equilibrium of light hydrocarbon mixtures by Monte Carlo simulation, Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 24 f: 4, p. 597-610, 2007.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 90 Pinch analysis revisited: New rules for utility targetting, Applied Thermal Engineering, v. 27 f: 8-9, p. 1653-1656, 2007.
ISSN/ISBN: 1359-4311
- 91 ; O.Q.F. Araujo; F.M. Goncalves; (RELEVANTE) Dynamic simulation of flash drums using rigorous physical property calculations, Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 24 f: 2, p. 277-286, 2007.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 92 ; Tavares, F.W.; Paredes, M.L.L.; R.A. Reis; (RELEVANTE) Evaluation of mixing and combining rules for asymmetric Lennard-Jones chain mixtures: Effect of segment diameter, energy interaction, and chain length, Fluid Phase Equilibria, v. 259 f: 1, p. 123-134, 2007.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 93 ; S.I. Sandler; (RELEVANTE) Computational quantum mechanics: An underutilized tool in thermodynamics, Pure and Applied Chemistry, v. 79 f: 8, p. 1345-1359, 2007.
ISSN/ISBN: 0033-4545
- 94 ; J.P.L. Santos; P.A. Melo; (RELEVANTE) Polymerization of 1-hexene using alpha-diimine nickel catalysts: Stochastic simulation of branch distribution, Polymer, v. 48 f: 17, p. 5152-5160, 2007.
ISSN/ISBN: 0032-3861

- 95 ; M.F. Alfradique; P.M. Ndiaye; (RELEVANTE) Critical points of adsorbed phases using a 2D lattice gas equation of state, *Fluid Phase Equilibria*, v. 244 f: 1, p. 2-19, 2007.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 96 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; G.F. Araujo; (RELEVANTE) Monte Carlo simulation of binary mixtures adsorbed on heterogeneous surfaces, *Latin American Applied Research*, v. 36 f: 4, p. 277-282, 2006.
ISSN/ISBN: 0327-0793
- 97 ; F.C. Peixoto; R.L.B. Rodrigues; (RELEVANTE) Closed vessel experiment modelling and ballistic parameter estimation of gun propellants for lifetime prediction, *Latin American Applied Research*, v. 36 f: 4, p. 229-233, 2006.
ISSN/ISBN: 0327-0793
- 98 ; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Modeling and simulation of reactive distillation columns using computer algebra, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29 f: 9, p. 1875-1884, 2005.
ISSN/ISBN: 0098-1354
- 99 ; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Effect of combining rules for cubic equations of state on the prediction of double retrograde vaporization, *Fluid Phase Equilibria*, v. 230 f: 1-2, p. 1-8, 2005.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 100 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Thermodynamic equilibrium of adsorbed phases, *Fluid Phase Equilibria*, v. 233 f: 1, p. 66-72, 2005.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 101 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) Thermodynamic equilibrium in systems with multiple adsorbed and bulk phases, *Chemical Engineering Science*, v. 60 f: 6, p. 1773-1782, 2005.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 102 ; Tavares, F.W.; (RELEVANTE) Centrifugation equilibrium of natural gas, *Chemical Engineering Science*, v. 60 f: 11, p. 2927-2936, 2005.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 103 ; Tavares, F.W.; R.O. Esposito; (RELEVANTE) Phase equilibrium calculations for confined fluids, including surface tension prediction models, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 22 f: 1, p. 93-104, 2005.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 104 ; Tavares, F.W.; R.P. Pecanha; L.S.F. Martins; (RELEVANTE) Centrifugation equilibrium for spheres and spherocylinders, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 281 f: 2, p. 360-367, 2005.
ISSN/ISBN: 0021-9797
- 105 ; M.F. Alfradique; B.M.M. Nogueira; (RELEVANTE) Modeling and simulation of supercritical extraction columns using computer algebra, *Journal of Supercritical Fluids*, v. 34 f: 2, p. 203-208, 2005.
ISSN/ISBN: 0896-8446
- 106 ; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) Automatic typesetting of formulas using computer algebra, *Tugboat*, v. 25 f: 2, p. 166-172, 2004.
ISSN/ISBN: 0896-3207
- 107 ; S.I. Sandler; L.A. Galicia-Luna; (RELEVANTE) Modeling the high-pressure behavior of binary mixtures of carbon dioxide plus alkanols using an excess free energy mixing rule, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 21 f: 4, p. 659-666, 2004.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 108 ; Tavares, F.W.; C.R.A. Abreu; (RELEVANTE) Influence of particle shape on the packing and on the segregation of spherocylinders via Monte Carlo simulations, *Powder Technology*, v. 134 f: 1-2, p. 167-180, 2003.
ISSN/ISBN: 0032-5910
- 109 ; Tavares, F.W.; C.R.A. Abreu; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) Monte Carlo simulations of the adsorption of chainlike molecules on two-dimensional heterogeneous surfaces, *Langmuir*, v. 19 f: 4, p. 1429-1438, 2003.
ISSN/ISBN: 0743-7463
- 110 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; (RELEVANTE) Monte Carlo simulation of adsorption using 2-D models of heterogeneous solids, *Aiche Journal*, v. 49 f: 3, p. 753-763, 2003.
ISSN/ISBN: 0001-1541
- 111 ; M.F. Alfradique; R.O. Esposito; (RELEVANTE) Automatic generation of procedures for the simulation of multistage separators using computer algebra, *Chemical Engineering Communications*, v. 189 f: 5, p. 657-674, 2002.
ISSN/ISBN: 0098-6445
- 112 ; E.M. Queiroz; (RELEVANTE) Energy targeting in heat exchanger network synthesis using rigorous physical property calculations, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 41 f: 6, p. 1511-1515, 2002.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 113 ; J. Tojo; A. Domínguez; (RELEVANTE) Automatic implementation of thermodynamic models for reliable parameter estimation using computer algebra, *Computers and Chemical Engineering*, v. 26 f: 10, p. 1473-1479, 2002.
ISSN/ISBN: 0098-1354
- 114 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) High pressure phase equilibrium calculations for hydrocarbon systems using an equation of state based on the lattice fluid theory, *Fluid Phase Equilibria*, v. 194, p. 599-607, 2002.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 115 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; R.R.C. Pinto; (RELEVANTE) Phase equilibria of binary mixtures by molecular simulation and cubic equations of state, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 18 f: 2, p. 149-161, 2001.
ISSN/ISBN: 0104-6632

- 116 ; Tavares, F.W.; R.P. Pecanha; R.O. Esposito; (RELEVANTE) Calculation of sedimentation equilibrium using a modified flash algorithm, *Chemical Engineering Science*, v. 56 f: 12, p. 3771-3779, 2001.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 117 ; Tavares, F.W.; V.R. Ahon; (RELEVANTE) A comparison of simulated annealing algorithms in the scheduling of multiproduct serial batch plants, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 17 f: 2, p. 199-209, 2000.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 118 ; Tavares, F.W.; R.O. Esposito; (RELEVANTE) Calculations of thermodynamic equilibrium in systems subject to gravitational fields, *Chemical Engineering Science*, v. 55 f: 17, p. 3495-3504, 2000.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 119 ; Tavares, F.W.; R.O. Esposito; (RELEVANTE) Phase equilibrium calculations for semicontinuous mixtures subject to gravitational fields, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 39 f: 11, p. 4415-4421, 2000.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 120 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) Calculation of mixture critical diagrams using an equation of state based on the lattice fluid theory, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 17 f: 4-7, p. 771-783, 2000.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 121 ; J.F. Brennecke; A.M. Scurto; G. Xu; M.A. Stadtherr; (RELEVANTE) Reliable computation of high-pressure solid-fluid equilibrium, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 39 f: 6, p. 1624-1636, 2000.
ISSN/ISBN: 0888-5885
- 122 ; Tavares, F.W.; C.R.A. Abreu; (RELEVANTE) A phase stability analysis of the combinatorial term of the UNIQUAC model, *Chemical Engineering Science*, v. 54 f: 7, p. 893-896, 1999.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 123 ; Tavares, F.W.; C.R.A. Abreu; R. Macias-Salinas; (RELEVANTE) A Monte Carlo simulation of the packing and segregation of spheres in cylinders, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 16 f: 4, p. 395-405, 1999.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 124 (RELEVANTE) Automatic implementation of thermodynamic models using computer algebra, *Computers and Chemical Engineering*, v. 23 f: 9, p. 1229-1245, 1999.
ISSN/ISBN: 0098-1354
- 125 ; S.I. Sandler; G.E. Alvarado; (RELEVANTE) Predictions of critical behavior using the Wong- Sandler mixing rule, *Journal of Supercritical Fluids*, v. 13 f: 1-3, p. 49-54, 1998.
ISSN/ISBN: 0896-8446
- 126 ; J.V.B. Martins; R.C. Batista; (RELEVANTE) Competitive strategy in the scheduling of multiproduct batch processes with due-date penalties, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 28, p. 251-256, 1998.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 127 ; Tavares, F.W.; O.D. Cuellar; (RELEVANTE) Monte Carlo simulation of particle segregation, *Powder Technology*, v. 97 f: 3, p. 200-207, 1998.
ISSN/ISBN: 0032-5910
- 128 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) Group contribution equation of state based on the lattice fluid theory: Alkane-alkanol systems, *Fluid Phase Equilibria*, v. 142 f: 1-2, p. 33-54, 1998.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 129 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) Group contribution lattice fluid equation of state: Application to polymer+solvent systems, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 15 f: 3, p. 313-319, 1998.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 130 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; M. Aznar; A.S. Telles; (RELEVANTE) A review of group contribution methods for the prediction of phase equilibria, *Latin American Applied Research*, v. 27, p. 1-24, 1997.
ISSN/ISBN: 0327-0793
- 131 ; S.I. Sandler; (RELEVANTE) Critical points with the Wong-Sandler mixing rule - II. Calculations with a modified Peng-Robinson equation of state, *Chemical Engineering Science*, v. 52 f: 20, p. 3579-3588, 1997.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 132 ; S.I. Sandler; (RELEVANTE) Critical points with the Wong-Sandler mixing rule .1. Calculations with the van der Waals equation of state, *Chemical Engineering Science*, v. 52 f: 19, p. 3393-3399, 1997.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 133 ; S.I. Sandler; G.L. Rochocz; (RELEVANTE) Critical point calculations for semi-continuous mixtures, *Fluid Phase Equilibria*, v. 139 f: 1-2, p. 137-153, 1997.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 134 ; S.I. Sandler; G.E. Alvarado; J. P. Wolbach; (RELEVANTE) Modeling of thermodynamically difficult systems, *Fluid Phase Equilibria*, v. 136 f: 1-2, p. 15-29, 1997.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 135 (RELEVANTE) Scheduling of batch chemical operations under uncertainty: Multiproduct serial plants, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 13 f: 3, p. 142-151, 1996.
ISSN/ISBN: 0104-6632
- 136 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) Group contribution equation of state based on the lattice fluid theory, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 13 f: 3, p. 116-129, 1996.
ISSN/ISBN: 0104-6632

- 137 ; R. Nobrega; L.A.A. Cruz; (RELEVANTE) Modelagem do equilíbrio de fases em sistemas poliméricos, Polímeros: Ciência e Tecnologia f: Abril, p. 35-42, 1994.
ISSN/ISBN: 0104-1428
- 138 ; L.A.A. Cruz; R. Nobrega; (RELEVANTE) Modelado del equilibrio de fases en sistemas polímero/ polímero/ solvente, Revista Información Tecnológica del Chile, v. 5 f: 4, p. 11-16, 1994.
ISSN/ISBN: 0716-8756
- 139 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; (RELEVANTE) Equations of state for chain-like polar fluids - a comparison of reference terms, Fluid Phase Equilibria, v. 99, p. 87-103, 1994.
ISSN/ISBN: 0378-3812
- 140 ; Tavares, F.W.; Mattedi, S.; F.W.M. Andrade; (RELEVANTE) Comparação das equações de estado SPHCT, Peng-Robinson, Soave e Soave modificada no cálculo de propriedades termodinâmicas, Revista Brasileira de Engenharia, Caderno de Engenharia Química, v. 10 f: 2, p. 49-68, 1993.
ISSN/ISBN: 0102-2687
- 141 ; A.S. Silva; (RELEVANTE) Automatic differentiation and implementation of thermodynamic models using a computer algebra system, Computers and Chemical Engineering, v. 17, p. S473-S478, 1993.
ISSN/ISBN: 0098-1354
- 142 ; A.S. Silva; (RELEVANTE) Uma revisão com aplicações à engenharia química, Revista Brasileira de Engenharia, Caderno de Engenharia Química, v. 10 f: 1, p. 65-94, 1993.
ISSN/ISBN: 0102-2687
- 143 (RELEVANTE) Approximate phase split calculations using the sigmoidal function, Latin American Applied Research, v. 22, p. 119-123, 1992.
ISSN/ISBN: 0327-0793
- 144 ; P.A.C. Rego; (RELEVANTE) Fast computation of binodal curves in polymer systems, Revista Brasileira de Engenharia, Caderno de Engenharia Química, v. 9 f: 1, p. 63-80, 1992.
ISSN/ISBN: 0102-2687
- 145 ; M.C. Gandur; (RELEVANTE) Calculation of chemical and phase equilibria at specified pressure and enthalpy in nonideal systems, Revista Brasileira de Engenharia, Caderno de Engenharia Química, v. 9 f: 2, p. 5-39, 1989.
ISSN/ISBN: 0102-2687
- 146 ; K.Rajagopal; (RELEVANTE) Um panorama da simulação estacionária de processos, Revista Brasileira de Engenharia, Caderno de Engenharia Química, v. 5, p. 31-43, 1989.
ISSN/ISBN: 0102-2687
- 147 ; Aa. Fredenslund; P. Rasmussen; (RELEVANTE) Calculation of simultaneous chemical and phase-equilibria in nonideal systems, Chemical Engineering Science, v. 44 f: 2, p. 237-248, 1989.
ISSN/ISBN: 0009-2509
- 148 ; K.Rajagopal; (RELEVANTE) Thermodynamic analysis of an alcohol distillery, Energy, v. 13 f: 5, p. 455-459, 1988.
ISSN/ISBN: 0360-5442

Artículos resumidos publicados en revistas

- 1 ; M.F. Alfradique; (RELEVANTE) Implementação automática de procedimentos para simulação de colunas de destilação reativa usando computação algébrica, Revista Brasileira de Engenharia Química, v. 21 f: 1, p. 25-25, 2005.
ISSN/ISBN: 0102-9843
- 2 ; Tavares, F.W.; Cabral, V.F.; M.F. Alfradique; Erratum to thermodynamic equilibrium of adsorbed phases [Fluid Phase Equilib. 233 (2005) 66-72], Fluid Phase Equilibria, v. 237 f: 1-2, p. 227-227, 2005.
ISSN/ISBN: 0378-3812

Evaluaciones

Tutorías/Orientaciones/Supervisiones

Otras Referencias

Información adicional:

1975 Miembro del Grupo de Honor de la Escuela Secundaria Santo Antonio María Zaccaria (dedicada a estudiantes con desempeño académico destacado en la institución), Río de Janeiro, Brasil, otorgado en 1975.

1976 Ocupa el primer lugar en los exámenes de ingreso a la Facultad de Química de la Universidad Federal de Río de Janeiro, Brasil (de aproximadamente 1000 candidatos).

1981 Diplomado Cum Laude en Ingeniería Química.

1991 Primer lugar en la selección pública de Profesor Asistente en Diseño de Procesos Químicos, Facultad de Química, Universidad Federal de Rio de Janeiro, Brasil.

Supervisor (o co-supervisor) de investigaciones destacadas realizadas por estudiantes de grado, en cinco ocasiones, en diferentes reuniones técnicas.

2000-2006 Becario del programa Científicos de nuestro estado, en tres períodos consecutivos de dos años. Otorgado por la Fundación de Ciencias del Estado de Río de Janeiro (FAPERJ) a unos pocos investigadores distinguidos que trabajan en el estado.

2006 Fulbright Senior Visiting Scholar en la Universidad de Delaware. Otorgado por la Comisión Fulbright, Departamento de Estado, EE.UU., 2006 (única persona en todos los campos de la Ingeniería que recibió una beca Fulbright en Brasil, en 2005).

2012 Otorgado un nombramiento continuo por la Universidad de Texas A&M en Qatar (No hay permanencia ("tenure") en TAMUQ: un nombramiento continuo, que es un nombramiento con renovación automática, dependiendo del desempeño, es el equivalente más cercano).

4/2014 Co-supervisor (con el Dr. Nimir Elbashir) del M.Sc. tesis Equilibrio multifásico de fluidos confinados en sistemas catalíticos Fischer-Tropsch por la que Samah Warrag recibió de Texas A&M el Premio Richard E. Ewing de la Universidad de Qatar a la excelencia en la investigación de estudiantes.

3/2015 Co-supervisor (con el Dr. Luc Véhot) de Rym Kanés, el primer estudiante reconocido con el Premio a la Excelencia en Seguridad de Procesos del Simposio de Seguridad de Procesos de Qatar.

2015- Revisor sobresaliente (logrado: marzo de 2015), International Journal of Greenhouse Gas Control, por estar dentro del percentil 10 superior de revisores de la Revista, en términos de la cantidad de revisiones de manuscritos completadas en los dos años anteriores.

4/2016 Co-supervisor (con el Prof. Ioannis Economou) de Noura A. A. Dawash, reconocido con el Premio al Estudiante de Posgrado del Programa de Ingeniería Química de TAMUQ.

4/2016 Co-supervisor (con el Prof. Ioannis Economou) del M.Sc. tesis Modelado termodinámico de fluidos confinados en medios porosos para la cual Noura A.A. Dawass recibió la Universidad de Texas A&M

en el premio Richard E. Ewing de Qatar a la excelencia en la investigación de estudiantes.

4/2017 Co-supervisor (con el Prof. Ioannis Economou) de Muaz Selam, reconocido con el Premio al Estudiante de Posgrado del Programa de Ingeniería Química de TAMUQ.

4/2017 Co-supervisor (con el Dr. Luc Véhot) de Abdulla Al-Mohannadi y Rashid Al-Muhannadi, estudiantes reconocidos con el Premio a la Excelencia en Seguridad de Procesos del Simposio de Seguridad de Procesos de Qatar..

Indicadores

Producción Bibliográfica	150
Artículos publicados en revistas científicas	150
Completo en revistas arbitradas	148
Completo en revistas NO arbitradas	0
Resumen	2