

Análise comparativa de métodos preditivos para determinação de propriedades termofísicas de acilgliceróis parciais de cadeia curta

D. S. DAMACENO¹, R. CERIANI¹

¹ Universidade Estadual de Campinas, Departamento de Desenvolvimentos de Processos e Produtos
E-mail para contato: rceriani@feq.unicamp.br

RESUMO – Nos últimos anos a indústria de óleos e gorduras vem crescendo em larga escala, principalmente por causa do aumento de produção de biocombustíveis. Como consequência, a demanda por propriedades termofísicas tem aumentado e, logo, dados experimentais e a modelagem termodinâmica envolvendo compostos da tecnologia de lipídios estão se tornando cada vez mais temas de pesquisa. Nesse contexto, este trabalho analisou a capacidade preditiva dos modelos de Ceriani *et al.* (2013), Zong *et al.* (2010), Marrero e Gani (2001), Tu e Liu (1996), Basařová e Svoboda (1995), Joback e Reid (1987), na predição da pressão de vapor (temperatura de ebulição), temperatura normal de ebulição e entalpia de vaporização de acilgliceróis parciais de cadeia curta (monocaprilina, monocaprina, dicaprilina e dicaprina). A comparação foi feita com base nos dados experimentais publicados recentemente por Damaceno *et al.* (2014). Baseado na análise da capacidade preditiva dos métodos selecionados, esse estudo recomenda os modelos de Ceriani *et al.* (2013), Zong *et al.* (2010) e Marrero e Gani (2001) para a estimativa das propriedades termofísicas selecionadas.

1. INTRODUÇÃO

Óleos e gorduras são uma fonte nutricional relevante de energia, de ácidos graxos essenciais, de vitaminas e de antioxidantes naturais, além da demanda recente como matéria-prima para produção de biodiesel. Em sua grande maioria, passam por algum tipo de processamento antes de serem destinados ao consumo humano. Além disso, derivados de óleos vegetais como ácidos graxos, ésteres graxos, triacilgliceróis, diacilgliceróis e monoacilgliceróis são importantes produtos oleoquímicos, de aplicação nas indústrias de alimentos e química. Neste contexto, o conhecimento e a descrição do comportamento de propriedades termofísicas de compostos graxos em função das diferentes variáveis de processamento podem ser de grande utilidade prática. No entanto, dados experimentais dessas propriedades na literatura aberta são bastante escassos, principalmente com relação aos acilgliceróis parciais. Por exemplo, no caso da temperatura de ebulição, até recentemente encontravam-se na literatura aberta apenas 6 dados experimentais a 0,13 kPa para 6 diferentes monoacilgliceróis (MAG) e nenhum dado para diacilgliceróis (DAG). Já para os triacilgliceróis (TAG), há em torno de 226 dados de reportados (Ceriani *et al.*, 2013; Damaceno *et al.*, 2014). Devido a essa carência, Damaceno *et al.* (2014) desenvolveram um trabalho experimental para determinação de dados de temperatura de ebulição à baixas pressões (1,0 kPa a 13,2 kPa) para quatro acilgliceróis parciais de cadeia curta,

denominados monocaprilina, monocaprina, dicaprilina e dicaprina, utilizando a técnica da calorimetria diferencial exploratória (DSC).

A literatura apresenta diversos trabalhos de aplicação do conceito de contribuição de grupos para a determinação de propriedades termofísicas de compostos puros, tais como: pressão de vapor (Ceriani *et al.*, 2013), entalpia de vaporização (Ceriani *et al.*, 2013; Basařová e Svoboda, 1995; Marrero e Gani, 2001; Tu e Liu, 1996), temperatura normal de ebulição (Marrero e Gani, 2001; Joback e Reid, 1987), viscosidade (Ceriani *et al.*, 2011; Díaz-Tovar *et al.*, 2011), propriedades críticas (Marrero e Gani, 2001; Joback e Reid, 1987), tensão superficial e densidade (Díaz-Tovar *et al.*, 2011), dentre outros. Alguns desses trabalhos foram desenvolvidos especificamente para compostos graxos, como os modelos de Ceriani *et al.* (2013), Ceriani *et al.* (2011) e Díaz-Tovar *et al.* (2011). Além disso, há outros métodos, como o de Zong *et al.* (2010) que prediz dados de pressão de vapor (temperatura de ebulição), entalpia de vaporização, dentre outras propriedades para acilgliceróis baseado num conceito que os autores denominaram *fragment-based approach*.

Do que foi exposto acima, este trabalho teve como objetivo analisar a capacidade preditiva dos modelos de Ceriani *et al.* (2013), Zong *et al.* (2010), Marrero e Gani (2001), Tu e Liu (1996), Basařová e Svoboda (1995), Joback e Reid (1987) na determinação de dados de pressão de vapor (temperatura de ebulição), temperatura normal de ebulição e entalpia de vaporização de acilgliceróis parciais de cadeia curta. Para efeito de comparação foram considerados os dados experimentais das temperaturas de ebulição da monocaprilina, monocaprina, dicaprilina e dicaprina, em uma faixa de pressão de 1,0 kPa a 13,2 kPa, e as correlações geradas pelos autores (descritas no item 2.1).

2. METODOLOGIA

2.1. Modelagem da pressão de vapor e entalpia de vaporização segundo Damaceno *et al.* (2014)

O modelo ajustado por Damaceno *et al.* (2014) para a pressão de vapor em função da temperatura foi baseado na equação DIPPR (Design Institute for Physical Properties):

$$\ln p = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT \quad (1)$$

onde p (kPa) é a pressão de vapor, T (K) é a temperatura de ebulição, e A , B , C e D são os parâmetros obtidos pela regressão dos dados experimentais (Damaceno *et al.*, 2014) em conjunto com a temperatura normal de ebulição (T_b) e ponto crítico (T_c , P_c), ambos calculados pelo método de contribuição de grupos de Marrero e Gani (2001), como sugerido por Ceriani *et al.* (2013).

Para a entalpia de vaporização (ΔH_{vap}), Damaceno *et al.* (2014) consideraram a equação de Clausius-Clapeyron (Poling *et al.*, 2004) com uma correção para extensão da dependência da entalpia de vaporização com a derivada da pressão de vapor em relação à temperatura até o ponto crítico (Equação 2). Os valores calculados para T_c (K) e P_c (kPa) por Marrero e Gani (2001) para monocaprilina, monocaprina, dicaprilina e dicaprina são: 771,15 K e 2252,3 kPa, 792,13 K e 1940,3 kPa, 836,43 K e 1350,5 kPa e 867,37 K e 1168,4 kPa, respectivamente.

$$\Delta H_{vap} = R(-B + CT + DT^2) \left(1 - T/T_c\right)^{p/P_c} \quad (2)$$

onde P_c (kPa) e T_c (K) são a pressão e temperatura críticas, respectivamente.

A Tabela 1 traz os parâmetros A , B , C e D das Equações 1 e 2 reportados por Damaceno *et al.* (2014). Os desvios médios relativos obtidos pelos autores no ajuste desses parâmetros entre temperatura de ebulição calculada e a experimental variaram entre 0,5 e 0,9 %

Tabela 1 – Parâmetros A , B , C e D para predição de p (kPa) e ΔH_{vap} (J/mol) segundo Damaceno *et al.* (2014)

Composto	Constantes			
	A	B	C	D
Monocaprilina	43,596	-13753,5	-1,327	-0,0119
Monocaprina	45,274	-14516,9	-1,347	-0,0132
Dicaprilina	48,264	-16351,6	-1,382	-0,0146
Dicaprina	48,451	-17363,6	-1,295	-0,0146

2.2. Modelos preditivos de propriedades termofísicas

A seguir são apresentados os modelos preditivos para temperatura normal de ebulição (T_{nb}), pressão de vapor (p) e entalpia de vaporização (ΔH_{vap}) avaliados nesse trabalho. As fórmulas químicas dos compostos considerados são: monocaprilina ou 1-octanoil glicerol ($C_{11}H_{22}O_4$), monocaprina ou 1-decanoil glicerol ($C_{13}H_{26}O_4$), dicaprilina ou 1,2-dioctanoil glicerol ($C_{19}H_{36}O_5$) e dicaprina ou 1,2-didecanoil glicerol ($C_{23}H_{44}O_5$). A divisão dos grupos funcionais de cada modelo considerado nesse trabalho para os acilgliceróis parciais está discriminada na Tabela 2.

Tabela 2 – Divisão em grupos funcionais dos acilgliceróis parciais segundo cada modelo considerado.

Modelo		Grupo							
		CH3	CH2	CH	OH	CH2COO	CHCOO	COO	CH2CHCH2
Ceriani <i>et al.</i> (2013)	p	X	X		X			X	X
Zong <i>et al.</i> (2010)	p e ΔH_{vap}								
Marrero e Gani (2001)	ΔH_{vap} e T_{nb}	X	X	X	X	X	X		
Tu e Liu (1996)	ΔH_{vap}								
Basařová e Svoboda (1995)	ΔH_{vap}	X	X	X	X			X	
Joback e Reid (1987)	T_{nb}	X	X	X	X			X	

Temperatura normal de ebulição (T_{nb} , em K): O modelo avaliado para T_{nb} foi o proposto por Joback e Reid (1987) (Equação 3).

$$T_{nb} = 198 + \sum_k N_k (t_{nbk}) \quad (3)$$

onde: N_k é o número de contribuições e t_{nbk} é a contribuição de cada grupo.

Vale lembrar que o modelo de Marrero e Gani (2001) (Equação 4) foi utilizado por Damaceno

et al. (2014) na predição da T_{nb} que foi acrescida ao banco de dados experimental juntamente com o ponto crítico para então se obter os parâmetros reportados na Tabela 1.

$$\exp(T_{nb}/T_{nb0}) = \sum_i N_i T_{nb1i} + \sum_j M_j T_{nb2j} + \sum_k O_k T_{nb3k} \quad (4)$$

onde: N_i , M_j e O_k é o número de contribuições e T_{nb1i} , T_{nb2j} e T_{nb3k} são as contribuições de cada grupo, e T_{nb0} é uma constante.

Pressão de vapor (p): foram avaliados o modelo de Ceriani *et al.* (2013) (Equação 5), que se baseia no método de contribuição de grupos (Tabela 2) e de Zong *et al.* (2010) (Equação 6) que utiliza o método de fragmentação das classes de compostos químicos, nesse caso: MAG/DAG/ C8:0/C10:0. Para a avaliação da capacidade preditiva das duas equações, foram considerados os desvios gerados na estimativa da temperatura de ebulição a uma dada pressão, visto que essa é a variável utilizada na simulação computacional de colunas de separação líquido-vapor (Ceriani, 2005).

$$\ln(p) = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) \quad (5)$$

onde p é a pressão de vapor em Pa, T é a temperatura em K, e A , B e C são parâmetros obtido pelo somatório de cada grupo.

$$\log(p) = \frac{-\Delta G_{\theta}^{vap}}{R\theta \ln 10} + \frac{\Delta H_{\theta}^{vap}}{R \ln 10} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{T} \right) \quad (6)$$

onde R é a constante dos gases, θ é a temperatura de referencia em 298,15 K, ΔH_{θ}^{vap} é a entalpia de vaporização e ΔG_{θ}^{vap} é a energia livre de Gibbs.

Entalpia de vaporização (ΔH_{vap}): pode ser estimada por cinco diferentes métodos, sendo que dois deles determinam ΔH_{vap} apenas a 298,15 K. São eles, os modelos de Marrero e Gani (2001) (Equação 7) e Zong *et al.* (2010) (Equação 8).

$$(\Delta H_{vap} - \Delta H_{vap0}) = \sum_i N_i H_{vap1i} + \sum_j M_j H_{vap2j} \quad (7)$$

onde ΔH_{vap} é a entalpia de vaporização a 298,15 K, N_i e M_j é o número de contribuições e H_{nb1i} e H_{nb2j} são as contribuição de cada grupo e H_{vap0} é uma constante.

$$\Delta H_{\theta}^{vap} = \sum_A N_{frag,A} \Delta H_{\theta,A}^{vap} \quad (8)$$

onde $N_{frag,A}$ é o número de fragmentos, $\Delta H_{\theta,A}^{vap}$ é a entalpia de vaporização de cada fragmento a 298,15.

Já os modelos de Ceriani *et al.* (2013) (Equação 9), Tu e Liu (1996) (Equação 10) e Basařová e Svoboda (1995) (Equação 11) determinam as entalpias de vaporização em qualquer temperatura da curva de vaporização.

$$\Delta H_{vap} = R(-B + CT) \left(1 - T/T_c \right)^{p/P_c} \quad (9)$$

onde: P_c (kPa) e T_c (K) são a pressão e temperatura críticas, B e C são obtidos pelos somatórios das contribuições dos grupos.

$$\Delta H_{vap} = \sum_i N_i [a_i(1-T/T_c)^{1/3} + b_i(1-T/T_c)^{2/3} + c_i(1-T/T_c)] \quad (10)$$

onde N_i é o número de fragmentos, a_i , b_i e c_i são os valores de cada contribuição

$$\Delta H_{vap} = A(1-T/T_c)^\alpha \exp[-\alpha(1-T/T_c)] \quad (11)$$

onde A e α são os obtidos pelos somatórios de cada contribuição.

3. RESULTADOS

A partir das Equações 1 e 2 e dos parâmetros apresentados na Tabela 1 foi possível determinar a T_{nb} e a ΔH_{vap} a 298,15 K para os MAG e DAG considerados nesse trabalho (Tabela 3). A Tabela 3 também apresenta os valores calculados pelos modelos de Joback e Reid (1987) e Marrero e Gani (2001). A T_{nb} apresentou 169,53 K e 26,39 % de desvios médios absoluto (DMA) e relativo (DMR) para o modelo de Joback e Reid (1987), respectivamente. As discrepâncias de 102 K a 298 K entre os valores preditos pelo modelo de Joback e Reid (1987) e de Marrero e Gani (Damaceno *et al.*, 2014) é notória. Cunico *et al.* (2013) também observaram que o modelo de Joback e Reid (1987) prediz valores divergentes em comparação com valores experimentais de T_{nb} para outros compostos graxos.

Tabela 3 – Temperatura normal de ebulição (T_{nb}) para os mono- e diacilgliceróis considerados nesse trabalho

Composto	Joback e Reid (1987)	Marrero e Gani segundo (Damaceno <i>et al.</i> (2014))
Monocaprilina	693,22	591,39
Monocaprina	738,98	612,63
Dicaprilina	842,3	656,58
Dicaprina	933,82	687,58

As entalpias de vaporização a 298,15 K obtidas pelos modelos de Marrero e Gani (2001) e Zong *et al.* (2010) estão reportadas na Tabela 4, em conjunto com os valores calculados pela Equação 2 com os parâmetros da Tabela 1. De uma forma geral, pode-se observar que o modelo de Zong *et al.* (2010) é capaz de prever os valores de Damaceno *et al.* (2014) com maior acurácia.

Tabela 4 – Entalpia de vaporização a 298,15 K para os MAG e DAG considerados nesse trabalho

Composto	$(\Delta H_{vap}$ kJ/mol)			Desvio relativo (%)	
	Marrero e Gani (2001)	Zong <i>et al.</i> (2010)	Damaceno <i>et al.</i> (2014)	Marrero e Gani (2001)	Zong <i>et al.</i> (2010)
Monocaprilina	123,8	91,9	102,2	21,2	10,0
Monocaprina	133,6	94,7	107,6	24,2	12,0
Dicaprilina	154,2	103,8	121,7	26,7	14,7
Dicaprina	173,9	109,3	130,4	33,3	16,2
			DMR	28,1	13,2

Os valores experimentais de temperatura de ebulição reportados por Damaceno *et al.* (2014) foram preditos pelos modelos de Ceriani *et al.* (2013) e de Zong *et al.* (2010). A Tabela 5 apresenta os valores experimentais e os valores preditivos pelos dois modelos, bem como os desvios absolutos (K)

e relativos (%).

Tabela 5 – Valores experimentais (Damaceno *et al.*, 2014) e preditos (Ceriani *et al.*, 2013; Zong *et al.*, 2010)

Composto	Experimental		Ceriani <i>et al.</i> (2013)			Zong <i>et al.</i> (2010)		
	Pressão (kPa)	Temperatura (K)	T_{calc} (K)	DA (K)	DR (%)	T_{calc} (K)	DA (K)	DR (%)
Monocaprilina	1,1	462,66	471,05	8,39	1,81	469,78	7,12	1,54
	1,5	468,91	476,6	7,69	1,64	476,05	7,14	1,52
	2,5	479,02	486,15	7,13	1,49	486,75	7,73	1,61
	3,1	484,24	490,35	6,11	1,26	491,41	7,17	1,48
	3,6	485,63	493,33	7,7	1,58	494,69	9,06	1,87
	4,3	490,19	496,93	6,74	1,38	498,66	8,47	1,73
	6,8	498,91	506,61	7,7	1,54	509,18	10,27	2,06
	10,1	507,96	515,43	7,47	1,47	518,63	10,67	2,10
	13,2	514,64	521,66	7,02	1,36	525,22	10,58	2,06
Monocaprina	1,1	478,69	483,26	4,57	0,95	485,42	6,73	1,41
	1,5	482,79	489,09	6,3	1,3	491,93	9,14	1,89
	2,5	491,77	499,15	7,38	1,5	503,02	11,25	2,29
	3,1	497,13	503,57	6,44	1,3	507,85	10,72	2,16
	3,6	498,31	506,71	8,4	1,69	511,26	12,95	2,60
	4,3	501,31	510,52	9,21	1,84	515,37	14,06	2,80
	6,8	511,21	520,74	9,53	1,87	526,28	15,07	2,95
	10,1	519,1	530,08	10,98	2,12	536,08	16,98	3,27
	13,2	524,41	536,69	12,28	2,34	542,92	18,51	3,53
Dicaprilina	1,1	511,93	504,65	7,28	1,42	506,31	5,62	1,10
	1,5	517,23	511,36	5,87	1,13	512,76	4,47	0,86
	2,5	529,42	522,96	6,46	1,22	523,75	5,67	1,07
	3,1	533,36	528,07	5,29	0,99	528,52	4,84	0,91
	3,6	538,14	531,69	6,45	1,2	531,89	6,25	1,16
	4,3	541,18	536,1	5,08	0,94	535,94	5,24	0,97
	6,8	552,59	547,94	4,65	0,84	546,70	5,89	1,07
	10,1	560,35	558,77	1,58	0,28	556,34	4,01	0,72
	13,2	567,73	566,44	1,29	0,23	563,06	4,67	0,82
Dicaprina	1	535,66	530,43	5,23	0,98	534,43	1,23	0,23
	1,1	538,32	532,61	5,71	1,06	536,50	1,82	0,34
	1,5	544,06	539,86	4,2	0,77	543,38	0,68	0,13
	2,5	554,25	552,41	1,84	0,33	555,08	0,83	0,15
	3,1	558,74	557,94	0,8	0,14	560,17	1,43	0,26
	3,6	562,37	561,88	0,49	0,09	563,76	1,39	0,25
	4,3	565,39	566,66	1,27	0,22	568,09	2,70	0,48

De forma geral, observa-se que o modelo de Ceriani *et al.* (2013) foi aquele que apresentou os menores desvios relativos, com exceção da dicaprina para o qual o modelo de Zong *et al.* (2010) obteve menores desvios. Com relação à entalpia de vaporização, Damaceno *et al.* (2014) reportam os valores experimentais apresentados na Tabela 6. A tabela também apresenta as faixas de valores calculados pelos modelos de Ceriani *et al.* (2013), Tu e Liu (1996) e Basařová e Svoboda (1995) para

as faixas de temperaturas de ebulição reportados na Tabela 5. Observou-se que o modelo de Tu e Liu (1996) superestima os valores de entalpia de vaporização, já os modelos de Ceriani *et al.* (2013) e Basařová e Svoboda (1995) os subestimam, porém fica claro que o modelo de Basařová e Svoboda (1995) foi o que apresentou os desvios absolutos maiores (31 kJ/mol, em média).

Tabela 6 – ΔH_{vap} experimental (Damaceno *et al.*, 2014) e o mínimo e o máximo de ΔH_{vap} dos modelos preditos

Composto	Faixa de temperatura (K)	ΔH_{vap} (kJ/mol)			
		Damaceno <i>et al.</i> (2014)	Ceriani <i>et al.</i> (2013)	Tu e Liu (1996)	Basařová e Svoboda (1995)
Monocaprilina	462,66-514,64	96,0	106,5-96,2	108,8-99,7	77,0-66,3
Monocaprina	478,69-524,41	111,7	105,9-97,0	115,6-107,3	79,2-69,5
Dicaprilina	511,93-567,73	107,0	98,5-90,0	124,1-113,8	86,4-75,2
Dicaprina	535,66-565,39	124,1	102,2-97,9	137,8-131,9	91,1-84,7

A Figura 1 mostra o comportamento da pressão de vapor de acordo com os modelos de Ceriani *et al.* (2013) e Zong *et al.* (2010), e da entalpia de vaporização, de acordo com os modelos de Ceriani *et al.* (2013), Tu e Liu (1996) e Basařová e Svoboda (1995) em função da temperatura reduzida ($T_r=T/T_c$) para a monocaprilina, calculadas desde 298 K até a sua temperatura crítica. A Figura também traz as curvas calculadas pelas Equações 1 e 2.

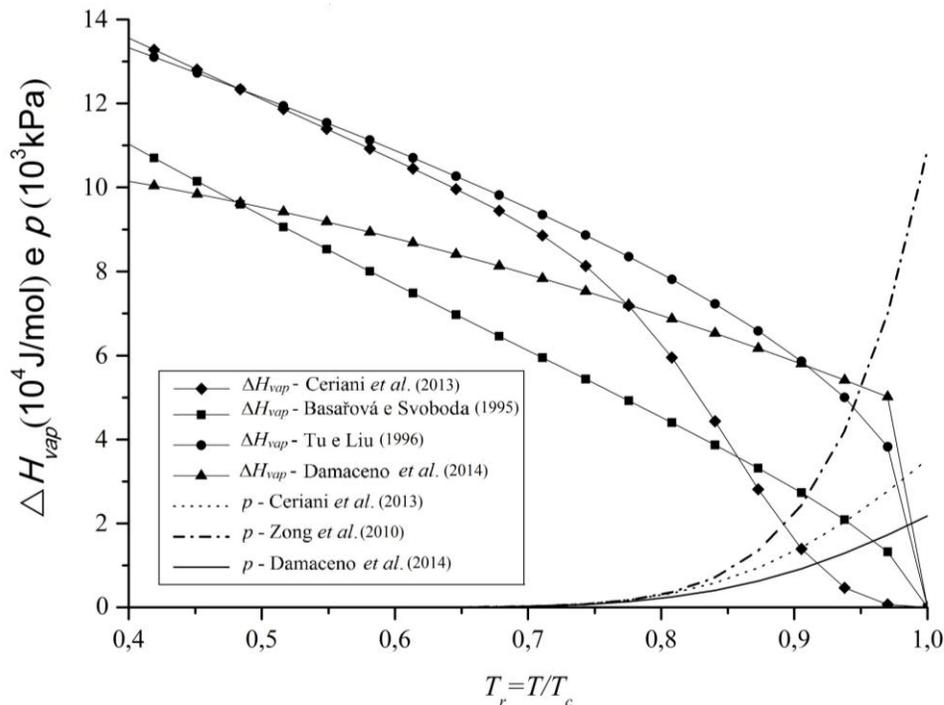


Figura 1 – Curvas de pressão de vapor (p) e de entalpia de vaporização (ΔH_{vap}) para a monocaprilina em função da T_r , conforme cada modelo

4. CONCLUSÃO

Predizer uma dada propriedade termofísica com alta acurácia é fundamental no desenvolvimento de processos químicos. Nesse trabalho foram selecionadas três propriedades termofísicas importantes de acilgliceróis parciais: pressão de vapor (temperatura de ebulição), entalpia de vaporização e temperatura normal de ebulição, e testados diferentes modelos preditivos baseados no conceito de contribuição de grupos e/ou fragmentos. Para a T_{nb} , o modelo de Joback e Reid (1987) apresentou desvio relativo de 26,39 %. O modelo de Zong *et al.* (2010) teve desempenho melhor para a ΔH_{vap} a 298,15 K do que o modelo de Marrero e Gani (2001). Em relação à temperatura de ebulição, o modelo de Ceriani *et al.* (2013) apresentou menores desvios relativos em comparação com Zong *et al.* (2010). Os modelos de Ceriani *et al.* (2013), Tu e Liu (1996) predisseram a ΔH_{vap} de forma equivalente, e o modelo de Basařová e Svoboda (1995) apresentou maiores discrepâncias.

5. REFERÊNCIAS

- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. *ASTM E1782*. Standard test method for determining vapor pressure by thermal analysis. Annual Book of ASTM Standards, v. 1402, 2008
- BASAŘOVÁ, P.; SVOBODA, V. Prediction of the enthalpy of vaporization by the group contribution method. *Fluid Phase Equilib.*, v. 105, n. 1, p. 27-47, 1995.
- CERIANI, R.; GANI, R.; LIU, Y.A. Prediction of vapor pressure and heats of vaporization of edible oil/fat compounds by group contribution. *Fluid Phase Equilib.*, v. 337, p. 53-59, 2013.
- CERIANI, R.; GONÇALVES, C.; COUTINHO, J. Prediction of viscosities of fatty compounds and biodiesel by group contribution. *Energ. Fuel.*, v. 25, p. 3712-3717, 2011.
- CERIANI, R. Simulação computacional de processos de desodorização e desacidificação de óleos vegetais. Campinas, 2005. Tese de doutorado – FEA UNICAMP. 2005.
- CUNICO, L. P.; GUIRARDELLO, R.; CERIANI, R. Estimation of Physical Properties of Vegetable Oils and Biodiesel using Group Contribution Methods. *Chem. Eng. Trans.*, v. 32, p. 535-540, 2013.
- DAMACENO, D. S.; MATRICARDE FALLEIRO, R. M.; MEIRELLES, A. J. A.; KRÄHENBÜHL, M. A.; MEIRELLES, A. J. A.; CERIANI, R. Boiling points of short-chain partial acylglycerols and tocopherols at low pressures by the Differential Scanning Calorimetry technique. *J. Chem. Eng. Data*, DOI: 10.1021/je401080p, 2014.
- DÍAZ-TOVAR, C.; GANI, R.; SARUP, B. Lipid technology: Property prediction and process design/analysis in the edible oil and biodiesel industries. *Fluid Phase Equilib.*, v. 302, n. 1-2, p. 284-293, 2011.
- JOBACK, K. G.; REID R. C. Estimation of pure-component properties from group-contributions. *Chem. Eng. Commun.*, v. 57, n. 1-6, p. 233-243, 1987.
- MARRERO, J.; GANI, R. Group-contribution based estimation of pure component properties. *Fluid Phase Equilib.*, v. 183-184, p. 183-208, 2001.
- POLING, B.E.; PRAUSNITZ, J.M.; O'CONNELL, J.P. The properties of gases and liquids. 5. ed., McGraw-Hill, 2004.
- TU, C.; LIU, C. Group-contribution estimation of the enthalpy of vaporization of organic compounds. *Fluid Phase Equilib.*, v. 121, n. 1-2, p. 45-65, 1996
- ZONG, L.; RAMANATHAN, S.; CHEN, C. Thermophysical Properties of Mono- and Diglycerides with the Chemical Constituent Fragment Approach. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 49, n. 11, p. 5479-5484, 2010.

Agradecimentos: R. Ceriani agradece à FAPESP, CAPES e CNPq pelo suporte financeiro e bolsas individuais.