

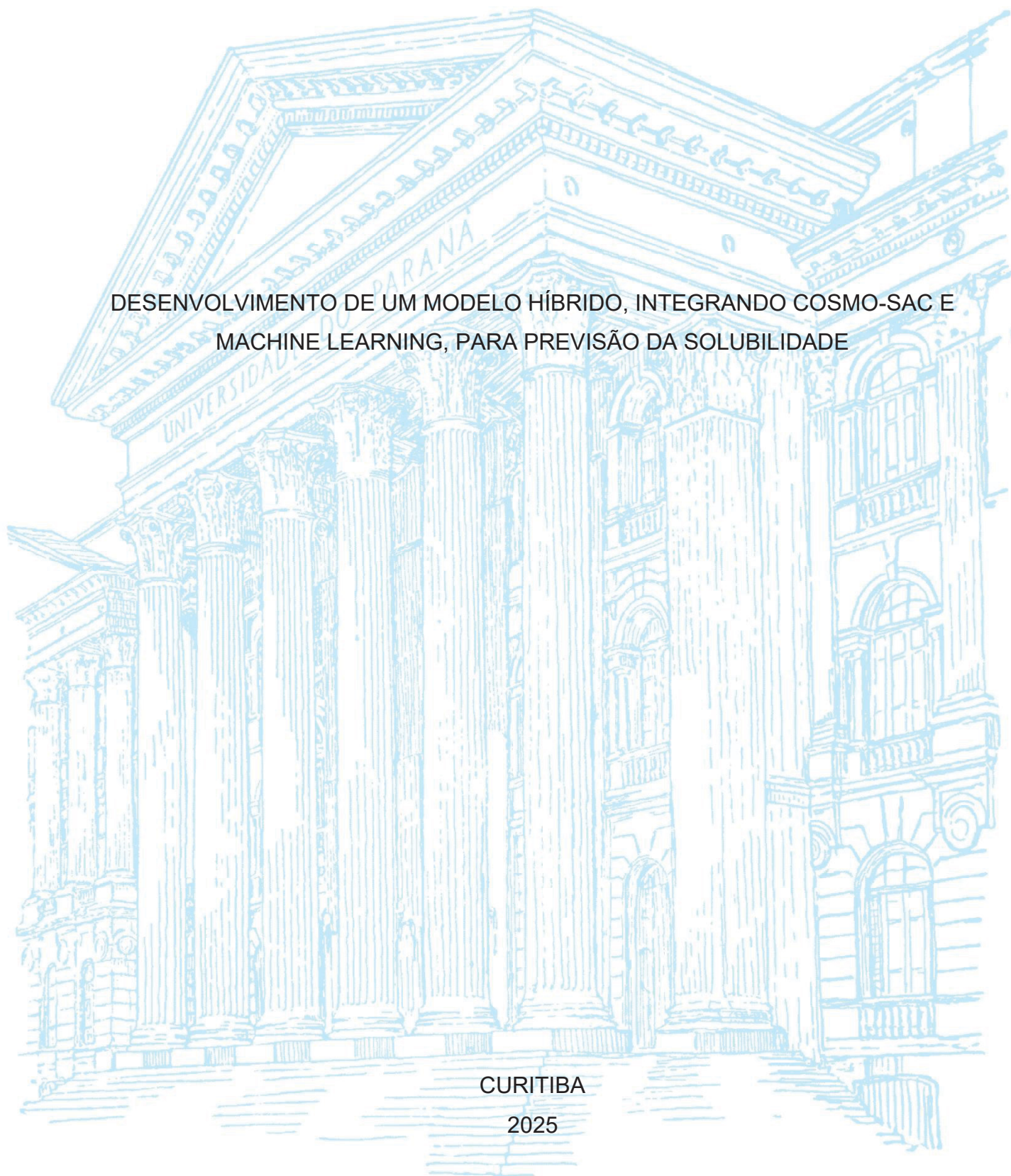
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

PAULO VITOR DE LIMA CARVALHO

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO HÍBRIDO, INTEGRANDO COSMO-SAC E
MACHINE LEARNING, PARA PREVISÃO DA SOLUBILIDADE

CURITIBA

2025



PAULO VITOR DE LIMA CARVALHO

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO HÍBRIDO, INTEGRANDO COSMO-SAC E
MACHINE LEARNING, PARA PREVISÃO DA SOLUBILIDADE

Dissertação de Mestrado apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia de Alimentos.

Orientadora: Prof(a). Dr(a). Grazielle Oliveira.

Coorientadora: Prof(a). Dr(a). Agnes de Paula Scheer.

CURITIBA

2025

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Carvalho, Paulo Vitor de Lima

Desenvolvimento de um modelo híbrido, integrando COSMO-SAC e machine learning, para previsão da solubilidade / Paulo Vitor de Lima Carvalho. – Curitiba, 2025.

1 recurso on-line : PDF.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos.

Orientador: Grazielle de Oliveira

Coorientador: Agnes de Paula Scheer

1. Equilíbrio sólido líquido. 2. Modelagem. 3. Cálculo - Computação. I. Universidade Federal do Paraná. II. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos. III. Oliveira, Grazielle de. IV. Scheer, Agnes de Paula. V. Título.

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação ENGENHARIA DE ALIMENTOS da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **PAULO VÍTOR DE LIMA CARVALHO**, intitulada: **DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO HÍBRIDO, INTEGRANDO COSMO-SAC E MACHINE LEARNING, PARA PREVISÃO DA SOLUBILIDADE**, sob orientação da Profa. Dra. GRAZIELLE DE OLIVEIRA, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 09 de Outubro de 2025.

Assinatura Eletrônica

09/10/2025 21:17:35.0

GRAZIELLE DE OLIVEIRA

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

09/10/2025 20:46:49.0

LUÍS RICARDO SHIGUEYUKI KANDA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

09/10/2025 18:21:12.0

LUANA CAROLINA BOSMULER ZUGE

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Dedico este trabalho à minha família, que sempre esteve ao meu lado e foi minha maior fonte de força. Ao meu pai, Vandr , e   minha m e, Maria Aparecida, pelo amor incondicional, pela paci ncia e por me ensinarem a nunca desistir dos meus sonhos. Aos meus av s, Carmelina, Nelson, Terezinha e Joaquim, que me transmitiram valores e inspira  o para seguir firme no meu caminho. E  s minhas tias, Julimary, Luzia e Margarida cuja presen a e apoio constante tornaram esta caminhada mais leve e cheia de afeto.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus, fonte de toda sabedoria e força, por me conceder saúde, perseverança e a oportunidade de trilhar este caminho. Sou grato por cada desafio que se apresentou, pois foram eles que me fortaleceram e me tornaram mais resiliente. Agradeço também pelas conquistas e pelas pessoas especiais que colocou em meu caminho, que me ampararam e me incentivaram a continuar sonhando e acreditando que é possível alcançar objetivos grandiosos por meio de dedicação e esforço.

Agradeço profundamente à minha família, em especial aos meus pais, Vandrê e Maria Aparecida, que foram e continuam sendo minha base sólida. Eles me ensinaram valores essenciais como disciplina, responsabilidade e humildade, além de me inspirarem com sua determinação e amor incondicional. Cada conquista alcançada é reflexo do apoio, dos conselhos e da paciência que sempre demonstraram ao longo de minha trajetória acadêmica.

Dedico este trabalho com todo o meu amor às minhas avós, que sempre me acolheram com carinho e me inspiraram com sua sabedoria e força. Em especial à minha avó Carmelina, cuja ternura, conselhos e exemplo de vida foram fundamentais para que eu mantivesse a determinação ao longo desta caminhada. Em memória dos meus avós Nelson, Terezinha e Joaquim, que já não estão fisicamente presentes, mas cujos ensinamentos, valores e amor continuam vivos em mim e foram essenciais para que eu chegasse até aqui. Esta conquista também é de vocês.

Sou grato às minhas tias, Julimary, Luzia e Margarida, que estiveram presentes em diferentes fases da minha vida. À minha tia Julimary, que sempre esteve ao meu lado, me apoiando e ajudando sempre que precisei. Sua presença e incentivo foram essenciais para que eu chegasse até aqui. À minha tia Luzia, cujo carinho e apoio constante me deram força para enfrentar os desafios e seguir em frente. Sua ajuda em momentos importantes fez toda a diferença nesta trajetória. Em especial, à tia Margarida, que me acolheu com carinho, período em que me preparava para o vestibular, proporcionando-me um ambiente de tranquilidade e suporte que foi fundamental para que eu pudesse me dedicar aos estudos e conquistar uma importante etapa da minha vida acadêmica.

Agradeço com muito carinho às minhas amigas Daniele e Marcela, que foram verdadeiros pilares durante minha graduação e pós-graduação. Em momentos em

que o caminho parecia difícil e sem solução, vocês estiveram ao meu lado, oferecendo apoio emocional, compreensão e motivação para que eu não desistisse. A amizade e companheirismo de vocês foram fundamentais para que eu pudesse superar os desafios e manter o foco na conclusão dessa etapa.

Sou profundamente grato aos meus professores, que desempenharam papel essencial na minha formação acadêmica, em especial as professoras Agnes de Paula Scheer e Grazielle Oliveira que me orientaram durante a minha jornada na pós-graduação. Cada um, à sua maneira, contribuiu para o meu crescimento intelectual, transmitindo não apenas conhecimentos técnicos e científicos, mas também valores éticos, senso crítico e paixão pela pesquisa. A dedicação de cada docente foi uma inspiração para que eu buscasse sempre fazer o meu melhor.

Estendo meus agradecimentos aos meus colegas de laboratório, LATOS, com quem compartilhei ideias, desafios e conquistas ao longo desta jornada. O convívio diário e o espírito colaborativo foram fundamentais para tornar o ambiente de pesquisa mais produtivo e enriquecedor, permitindo o aprendizado contínuo e o desenvolvimento de novas habilidades.

Por fim, expresso minha sincera gratidão ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos (PPGEAL) e à Universidade Federal do Paraná (UFPR), que me proporcionaram não apenas a infraestrutura necessária, mas também um ambiente de aprendizado rico e inspirador. Estar presente em um ambiente plural de ideias e de excelência me permitiu amadurecer tanto como pessoa quanto como profissional, ampliando minha visão científica e fortalecendo meu compromisso com a pesquisa. Agradeço, ainda, à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro concedido, fundamental para a realização desta pesquisa e para a continuidade do meu desenvolvimento acadêmico.

“Não sou a mesma de antes. Não sei se sou a mesma de sempre, ou se sou a mesma de agora, ou se sou a mesma de amanhã. Mas sei que não sou a mesma de antes.”

Lewis Carroll, 1865.

RESUMO

A extração eficiente de compostos bioativos é amplamente valorizada pelas indústrias de alimentos, farmacêutica e de cosméticos por suas diversas propriedades funcionais. Para tal, desafios técnico e ambiental, sobretudo quando se busca alinhar o processo aos princípios da química verde, são encontrados. Nesse contexto, a escolha adequada de solventes é um fator crítico, dado a ampla gama de solventes disponíveis, diferentes interações moleculares, bem como diversos parâmetros de processo, que influenciam na eficiência da seleção. Modelos termodinâmicos preditivos, como o COSMO-SAC (*CONductor-like Screening Model for Segmented Activity Coefficients*), nos auxiliam na seleção desses solventes. No entanto, ao empregarmos essa ferramenta, algumas limitações são encontradas, como altos desvios quantitativos entre os dados experimentais e preditos, principalmente em sistemas complexos. Diante desse cenário, este trabalho teve como objetivo desenvolver e validar um modelo híbrido que integra o COSMO-SAC e *machine learning* para a predição da solubilidade. Para isso, inicialmente foi construída uma base de dados de solubilidade experimentais encontrados na literatura, totalizando 1.950 pontos, incluindo 22 solutos, 44 solventes em 60 diferentes temperaturas. Na sequência, o COSMO-SAC foi utilizado para prever a solubilidade dos sistemas encontrados, apresentando desvios significativos nas previsões quantitativas em comparação com os dados experimentais. Para correção desses desvios, um modelo de *machine learning* baseado em Regressão por Processos Gaussianos (GPR) foi implementado para corrigir essas falhas, a partir do treinamento com dados experimentais. Os resultados obtidos em ambos os modelos foram avaliados por métricas estatísticas de desempenho, coeficiente de determinação (R^2), raiz do erro quadrático médio (do inglês Root Mean Square Error, RMSE) e desvio relativo absoluto (Average Absolute Relative Deviation, AARD) médio e por técnicas de interpretabilidade baseadas em valores SHAP (*SHapley Additive exPlanations*), que permitiram identificar as variáveis mais relevantes para a previsão. Os resultados demonstraram ganhos expressivos, o R^2 médio evoluiu de 0,75 para 0,99, enquanto as métricas de erro apresentaram reduções médias superiores a 90% RMSE e 60% AARD, confirmando a capacidade do modelo híbrido melhorar substancialmente a acurácia preditiva. Dessa forma, a abordagem proposta representa uma contribuição de métodos preditivos para a seleção de solventes e para o desenvolvimento de processos de separação e extração mais eficientes. Assim, este trabalho contribui com uma ferramenta computacional robusta, replicável e confiável para suporte à previsão de solubilidade e ao planejamento racional de processos.

Palavras-chave: equilíbrio sólido-líquido; soluções não ideais; modelagem preditiva; cálculo computacional.

ABSTRACT

The efficient extraction of bioactive compounds is highly valued by the food, pharmaceutical, and cosmetic industries due to their various functional properties. However, technical and environmental challenges arise, especially when aiming to align processes with the principles of green chemistry. In this context, the appropriate selection of solvents is a critical factor, given the wide range of available solvents, distinct molecular interactions, and multiple process parameters that influence extraction efficiency. Predictive thermodynamic models, such as COSMO-SAC (COnductor-like Screening Model for Segmented Activity Coefficients), assist in solvent selection. Nevertheless, when employing this tool, certain limitations are encountered, including large quantitative deviations between experimental and predicted data, particularly in complex systems. Given this scenario, the objective of this work was to develop and validate a hybrid model that integrates COSMO-SAC and machine learning for solubility prediction. To this end, a database of experimental solubility data collected from the literature was built, comprising 1.950 data points, including 22 solutes, 44 solvents, and 60 different temperatures. Subsequently, COSMO-SAC was used to predict the solubility of the systems, showing significant deviations compared to experimental values. To correct these deviations, a machine learning model based on Gaussian Process Regression (GPR) was implemented and trained using experimental data. The performance of both models was evaluated using statistical metrics, such as the coefficient of determination (R^2), root mean square error (RMSE), and average absolute relative deviation (AARD), as well as interpretability techniques based on SHAP (SHapley Additive exPlanations) values to identify the most relevant variables for prediction. The results showed remarkable improvements: the average R^2 increased from 0.75 to 0.99, while RMSE and AARD decreased by more than 90% and 60%, respectively, confirming the hybrid model's ability to substantially enhance predictive accuracy. Therefore, the proposed approach represents a relevant contribution to improving predictive methods for solvent selection and the development of more efficient separation and extraction processes. This work provides a robust, replicable, and reliable computational tool to support solubility prediction and the rational design of processes.

Keywords: solid-liquid equilibrium; non-ideal solutions; predictive modeling; computational calculation.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - REPRESENTAÇÃO DA BLINDAGEM SOFRIDA PELAS MOLÉCULAS EM UM CONDUTOR	26
FIGURA 2 – PONTOS DA SUPERFÍCIE COM CARGAS INDUZIDAS PARA MOLÉCULA DE ÁGUA DISCRETIZADA EM SEGMENTOS.	29
FIGURA 3 – REPRESENTAÇÃO DA SUPERFÍCIE DE CARGAS INDUZIDAS PARA MOLÉCULA DE ÁGUA DISCRETIZADA EM SEGMENTOS.	29
FIGURA 4 – REPRESENTAÇÃO DA SUPERFÍCIE DE CARGA INDUZIDA PARA AS MOLÉCULAS DE ÁGUA E ACETONA.	30
FIGURA 5 - FLUXOGRAMA DA METODOLOGIA EMPREGADA NO ESTUDO	39
FIGURA 6 - DISPERSÃO ENTRE VALORES PREVISTOS PELO COSMO-SAC E VALORES EXPERIMENTAIS DE SOLUBILIDADE.	49
FIGURA 7 - DISPERSÃO ENTRE VALORES PREVISTOS PELO COSMO-SAC E GPR E VALORES EXPERIMENTAIS DE SOLUBILIDADE.	54
FIGURA 8 - CONTRIBUIÇÃO MÉDIA DE CADA VARIÁVEL NA PREVISÃO DE SOLUBILIDADE PELO MODELO GPR	60
FIGURA 9 - EFEITO DAS VARIÁVEIS DE ENTRADA NA CORREÇÃO DE SOLUBILIDADE VIA GPR	61
FIGURA 10 - RELAÇÃO ENTRE X_{COSMO} E SEU IMPACTO NO MODELO GPR	61
FIGURA 11 - GRÁFICOS DE PARIDADE PARA OS SISTEMAS DE VALIDAÇÃO: (A) E (B) CAFEÍNA, (C) E (D) ÁCIDO BENZOICO	66

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - CONJUNTO REPRESENTATIVO DA BASE DE DADOS	
EXPERIMENTAL	45
TABELA 2 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O	
COSMO-SAC ISOLADO.	50
TABELA 3 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O	
COSMO-SAC E GPR.....	55
TABELA 4 - HIPERPARÂMETROS DO MODELO GPR E VALORES AJUSTADOS	59
TABELA 5 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O	
SISTEMA CAFEÍNA.....	64
TABELA 6 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O	
SISTEMA ÁCIDO BENZOICO	65

LISTA DE ABREVIATURAS OU SIGLAS

AARD – Desvio Relativo Absoluto Médio

CO₂ – Dióxido de Carbono

COSMO-RS – COnductor-like Screening Model for Realistic Solvents

COSMO-SAC – COnductor-like Screening Model for Segmented Activity Coefficients

ESL – Equilíbrio Sólido-Líquido

GPR – Regressão por Processos Gaussianos

IA – Inteligência Artificial

N₂ – Nitrogênio

NRTL – Non-Random Two-Liquid

PSO – Particle Swarm Optimization

RBF – Radial Basis Function

RMSE – Raiz do erro quadrático médio

SHAP – *SHapley Additive exPlanations*

UNIFAC – UNIversal Functional-group Activity Coefficients

UNIQUAC – UNIversal QUAsi-Chemical

LISTA DE SÍMBOLOS

f – fugacidade do componente i ;
 G^E – Energia de Gibbs em excesso;
 L – Corresponde a fase Líquida;
 $\ln$ – Logaritmo natural;
 $\log$ – logaritmo de base 10;
 $\log K_{ow}$ – Coeficiente de partição n-octanol/água;
 P – Pressão total do sistema;
 R – Constante universal dos gases;
 R^2 – Coeficiente de determinação;
 S – Corresponde a fase sólido;
 T – Temperatura do sistema em unidade absoluta Kelvin (K);
 T_f – Temperatura de fusão em unidade absoluta Kelvin (K);
 $WALK_{mix}$ – Média ponderada dos valores de $\log K_{ow}$ de cada solvente;
 x – Fração molar;
 x_{COSMO} – fração molar obtida via COSMO-SAC;
 x_{exp} – fração molar experimental.
 x_{GPR} – fração molar obtida via modelo híbrido COSMO-SAC+GPR;
 γ – Coeficiente de atividade;
 ΔH_f – Entalpia molar de fusão;
 μ_i – Potencial Químico da espécie química i ;
 σ – Densidade de carga;
 Φ – Coeficiente de atividade;

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	16
1.1 OBJETIVOS	18
1.1.1 Objetivo geral	18
1.1.2 Objetivos específicos	18
2 REVISÃO DE LITERATURA	19
2.1 COMPOSTOS BIOATIVOS	19
2.1.1 Solventes empregados na extração de compostos bioativos	20
2.1.2 Seleção de solventes	22
2.2 TERMODINÂMICA DE SOLUÇÕES	22
2.2.1 Equilíbrio sólido-líquido	22
2.2.2 Fugacidade e coeficiente de atividade	24
2.3 MODELO COSMO-SAC	26
2.3.1 Perfil- σ	28
2.4 INTEGRAÇÃO ENTRE MODELOS TERMODINÂMICOS E ABORDAGENS COMPUTACIONAIS	31
2.4.1 Inteligência artificial aplicada à engenharia química e de alimentos	32
2.4.2 Conceitos básicos de <i>machine learning</i>	33
2.4.3 Regressão por Processos Gaussianos (GPR)	34
2.4.4 Interpretabilidade do aprendizado de máquina	35
2.5 ESTADO DA ARTE	36
3 METODOLOGIA	39
3.1 BASE DE DADOS	40
3.2 MODELAGEM TERMODINÂMICA	40
3.3 MODELAGEM COM <i>MACHINE LEARNING</i>	41
3.4 AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO	42
3.4.1 Métricas de avaliação estatística	42
3.4.2 Análise de interpretabilidade SHAP	43
3.4.3 Teste de validação do COSMO+GPR para novos sistemas	43
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	45
4.1 DESCRIÇÃO DA BASE DE DADOS UTILIZADA NO ESTUDO	45
4.2 RESULTADOS DA PREVISÃO OBTIDA VIA COSMO-SAC	48

4.3 RESULTADOS DO MODELO DE <i>MACHINE LEARNING</i> (GPR)	53
4.3.1 Análise de sensibilidade do modelo GPR.....	58
4.4 ANÁLISE DE INTERPRETABILIDADE (SHAP)	59
4.5 COMPARAÇÃO DE DESEMPENHO ENTRE PREDIÇÃO VIA COSMO-SAC E COSMO-SAC + GPR	62
4.6 TESTE DE VALIDAÇÃO DO MODELO HÍBRIDO COSMO-SAC+GPR.....	64
5 CONCLUSÃO	68
REFERÊNCIAS.....	69
APÊNDICE I - CÓDIGO PARA CÁLCULO DA SOLUBILIDADE USANDO O MODELO COSMO-SAC-HB2 NO JCOSMO	76
APÊNDICE II – CÓDIGO-FONTE PARA CORREÇÃO DOS DADOS DE SOLUBILIDADE VIA GPR (GAUSSIAN PROCESS REGRESSION)	78
APÊNDICE III – TABELA COM A BASE DE DADOS EXPERIMENTAIS E RESULTADOS PREDITOS PELOS MODELOS COSMO-SAC-HB2 E GPR.....	80

1 INTRODUÇÃO

Os compostos bioativos têm despertado um interesse cada vez maior por parte da comunidade científica e das indústrias de alimentos, fármacos e cosméticos. Trata-se de substâncias encontradas em diferentes matrizes naturais, como frutas, vegetais, grãos e até mesmo resíduos agroindustriais, que exercem efeitos fisiológicos benéficos além da nutrição básica. Entre eles, destacam-se os polifenóis, os carotenoides, os fitoesteróis e os peptídeos, conhecidos por suas propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e antimicrobianas, além do potencial de auxiliar na prevenção de doenças crônicas, como diabetes, hipertensão e distúrbios cardiovasculares (Mondal et al., 2021; Shahidi; Ambigaipalan, 2015).

Esse cenário acompanha uma tendência global de busca por ingredientes naturais e funcionais, capaz de atender a um consumidor cada vez mais atento às questões de saúde e sustentabilidade. Contudo, apesar da ampla disponibilidade de fontes naturais, a extração eficiente desses compostos ainda é um desafio. Os métodos tradicionais, muitas vezes, envolvem solventes tóxicos ou alto consumo energético, o que contrasta com a necessidade de processos mais limpos e alinhados aos princípios da química verde (Claux et al., 2021; Matić et al., 2024).

Nesse sentido, a incorporação de princípios da sustentabilidade e da economia circular aos processos industriais promove o uso eficiente de recursos naturais, minimiza a geração de resíduos e valoriza subprodutos, transformando passivos ambientais em ativos econômicos. A sustentabilidade baseia-se em três pilares principais: ambiental, econômico e social, buscando equilibrar o desenvolvimento econômico com a preservação ambiental e o bem-estar social (Rajguru; Kautish, 2023). Já a economia circular propõe um modelo regenerativo, onde os resíduos são constantemente reaproveitados, prolongando o ciclo de vida dos materiais e reduzindo a dependência de recursos naturais virgens (Hysa; Çela, 2023).

Inseridos nesse contexto, os princípios da química verde desempenham um papel fundamental, priorizando o uso de matérias-primas renováveis, a redução ou eliminação de substâncias tóxicas, a eficiência no uso de energia e a prevenção da geração de resíduos ao invés do tratamento posterior (Anastas; Warner, 2000; Horváth; Anastas, 2007). Essa abordagem integrada fortalece o desenvolvimento de processos mais limpos, seguros e sustentáveis, alinhados às metas globais de

redução de impactos ambientais e à transição para uma economia mais circular e resiliente.

No entanto, encontrar o solvente ideal para a extração de forma eficiente e sustentável dos compostos de interesse é um desafio que requer avanços tecnológicos, pois a escolha inadequada de solventes pode aumentar o impacto ambiental, comprometer o rendimento do processo e inviabilizar a disponibilidade do composto de interesse para consumo.

Solventes convencionais, como hexano e clorofórmio, embora altamente eficientes na extração de compostos bioativos, trazem sérias preocupações ambientais e toxicológicas. Por isso, a busca por alternativas mais seguras e sustentáveis, alinhadas aos princípios da química verde, tem se intensificado nos últimos anos. Nesse contexto, o modelo COSMO-SAC (*CONductor-like Screening Model for Segmented Activity Coefficients*) pode ser aplicado como uma ferramenta estratégica, capaz de prever o comportamento termodinâmico de diferentes sistemas e auxiliar na seleção de solventes de menor impacto ambiental (Lin, Shiang-Tai; Sandler, 2002; Gerber, Renan P.; Soares, 2010).

Apesar de suas vantagens, o COSMO-SAC ainda apresenta limitações, sobretudo em sistemas complexos e altamente polares, podendo ocorrer desvios significativos em relação aos dados experimentais (Antolović; Vrabec; Klajmon, 2024). Para superar esses desafios, métodos de *machine learning* surgem como aliados poderosos à modelagem termodinâmica. Entre eles, destaca-se a Regressão por Processos Gaussianos (GPR), reconhecida pela capacidade de capturar não linearidades e incertezas em sistemas químicos e de fornecer previsões mais robustas mesmo com conjuntos de dados relativamente limitados (Jin et al., 2025; Rasmussen, 2004).

Portanto, a integração entre COSMO-SAC e algoritmos de aprendizado de máquina, como o GPR, representa um avanço significativo. Essa abordagem híbrida combina o rigor físico-químico do modelo termodinâmico com a flexibilidade estatística oferecida pela *machine learning*, resultando em previsões mais precisas de solubilidade e melhor seleção de solventes verdes. Tal sinergia amplia o potencial de aplicação em processos industriais sustentáveis, reduzindo a dependência de ensaios experimentais extensivos e acelerando o desenvolvimento de tecnologias alinhadas à economia circular.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Integrar COSMO-SAC (*COnductor-like Screening MOdel – Segment Activity Coefficients*) ao GPR (*Gaussian Process Regression*) para melhorar previsão de solubilidade.

1.1.2 Objetivos específicos

- Reunir e sistematizar dados experimentais de solubilidade de compostos de interesse para as indústrias alimentícia, química e farmacêutica, a partir da literatura científica;
- Aplicar o modelo COSMO-SAC na previsão da solubilidade dos sistemas selecionados, permitindo a comparação direta entre valores teóricos e experimentais;
- Avaliar a capacidade preditiva do modelo COSMO-SAC na determinação da solubilidade de compostos, identificando suas principais limitações em sistemas complexos;
- Integrar o COSMO-SAC com o modelo de Regressão por Processos Gaussianos (GPR), utilizando parâmetros moleculares, termodinâmicos e físico-químicos como variáveis de entrada;
- Validar o desempenho do modelo híbrido COSMO-SAC + GPR por meio da comparação entre valores experimentais e predições, utilizando métricas estatísticas o coeficiente de determinação (R^2), a raiz do erro quadrático médio (RMSE, do inglês *Root Mean Squared Error*) e desvio relativo absoluto médio (AARD, *Average Absolute Relative Deviation*);
- Investigar a sensibilidade do modelo em relação à disponibilidade de parâmetros experimentais, verificando sua robustez em cenários de informação incompleta;
- Contribuir para o avanço científico e tecnológico na área de processos sustentáveis, disponibilizando códigos computacionais em *Python* e bases de dados estruturadas que possam apoiar futuras pesquisas;

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 COMPOSTOS BIOATIVOS

Os compostos bioativos são substâncias naturais, encontrados em plantas, animais e microrganismos, esses compostos incluem vitaminas, polifenóis, carotenoides, ácidos graxos ômega-3 e peptídeos bioativos. Eles têm se destacado por suas propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e antimicrobianas, contribuindo significativamente para a prevenção de doenças crônicas, como diabetes tipo 2 e problemas cardiovasculares (Xavier *et al.*, 2024).

Além disso, eles podem ser classificados de acordo com sua natureza química em diferentes grupos, como polifenóis, carotenoides, fitoesteróis, ácidos graxos essenciais e peptídeos bioativos (Shahidi; Ambigaipalan, 2015). Essa diversidade estrutural explica a variedade de mecanismos de ação observados, que vão desde a neutralização de radicais livres até a modulação de processos metabólicos e inflamatórios no organismo humano. Suas fontes também são amplas: frutas, verduras, grãos, sementes, óleos e até resíduos agroindustriais, o que reforça a importância de estratégias que promovam o aproveitamento integral da cadeia produtiva.

A importância está diretamente relacionada à crescente busca por alternativas naturais e sustentáveis nos setores alimentício, farmacêutico e cosmético. Em particular, sua aplicação como conservante natural em alimentos se alinha à demanda global por métodos de preservação mais seguros e ecologicamente responsáveis. Compostos bioativos extraídos de resíduos agroindustriais, ricos em polifenóis e óleos essenciais, têm mostrado eficácia na extensão da vida útil de alimentos e na manutenção de sua qualidade (Baglary *et al.*, 2024).

A extração sustentável desses compostos é um tema emergente, com tecnologias inovadoras, como a extração assistida por ultrassom, micro-ondas e o uso de solventes verdes, ganhando cada vez mais destaque. Entre os fatores determinantes do processo, o solvente utilizado exerce papel crucial, pois sua polaridade, seletividade e toxicidade influenciam diretamente o rendimento, a pureza e a segurança dos extratos obtidos. A escolha inadequada pode comprometer tanto a eficiência da recuperação dos bioativos quanto a viabilidade ambiental e econômica do processo (Baglary *et al.*, 2024).

Dessa forma, os compostos bioativos, desempenham um papel essencial no desenvolvimento de alimentos funcionais, reforçando a conexão entre nutrição, saúde e sustentabilidade. A pesquisa contínua nesse campo destaca seu potencial para promover o bem-estar humano e atender às exigências de consumidores cada vez mais conscientes sobre os impactos de suas escolhas.

2.1.1 Solventes empregados na extração de compostos bioativos

A extração com solventes é uma técnica amplamente utilizada para isolar compostos bioativos de diferentes matrizes, sendo especialmente eficaz devido à seletividade e eficiência desse método. O princípio baseia-se na solubilidade diferencial de compostos em dois líquidos imiscíveis, normalmente uma fase aquosa e outra orgânica. O composto alvo migra para o solvente onde sua solubilidade é maior, permitindo sua separação e concentração (Atasoy et al., 2018; Shourie et al., 2022).

Os solventes utilizados variam de acordo com a polaridade do composto de interesse. Solventes apolares, como hexano, são usados para extrair compostos hidrofóbicos, enquanto solventes polares, como etanol e metanol, são indicados para compostos hidrofílicos. Recentemente, líquidos iônicos têm ganhado destaque por suas propriedades únicas, como baixa volatilidade e toxicidade reduzida, tornando-os uma alternativa promissora aos solventes orgânicos convencionais (Al Momani *et al.*, 2023).

Além da eficiência técnica, a extração com solventes desempenha um papel importante na sustentabilidade, especialmente ao ser aplicada na recuperação de compostos bioativos de resíduos agroindustriais e outras fontes naturais. Esse processo contribui para a economia circular ao agregar valor à subprodutos, reduzindo o desperdício e o impacto ambiental (Boppa *et al.*, 2023).

Tecnologias verdes têm sido desenvolvidas para melhorar o processo de extração, diminuindo o uso de solventes tóxicos e otimizando o consumo de energia. Métodos como extração assistida por ultrassom e extração com líquidos supercríticos são exemplos de abordagens inovadoras, que não apenas reduzem o emprego de solventes tóxicos, mas também diminuem o tempo e o consumo de energia envolvidos na extração (Cavalcante et al., 2017; Shourie et al., 2022).

A água é um dos solventes verdes mais importantes devido à sua abundância, baixo custo e propriedades físico-químicas que favorecem a extração seletiva de compostos bioativos em condições sustentáveis (Castro-Puyana; Marina; Plaza, 2017). Alinhada ao quinto princípio da química verde, que prevê a redução de solventes tóxicos, minimizando resíduos perigosos (Anastas; Warner, 2000). Em condições sub ou supercríticas, sua polaridade ajustável amplia sua aplicabilidade na extração de diversas biomoléculas, sendo amplamente utilizada nos setores alimentício, farmacêutico e cosmético. Apesar das limitações, avanços tecnológicos têm otimizado seu uso industrial, tornando-o mais sustentável (Lachos-Perez *et al.*, 2017).

Diversos outros solventes têm sido explorados para a extração de compostos bioativos, visando maior eficiência e menor impacto ambiental. Os acetatos, como o acetato de etila, destacam-se por sua baixa toxicidade e boa capacidade de solubilização (Capello; Fischer; Hungerbühler, 2007). Já os álcoois, especialmente etanol e isopropanol, são amplamente utilizados devido à sua compatibilidade com produtos alimentícios e farmacêuticos (Clark & Tavener, 2007; Chemat *et al.*, 2012). Os ácidos carboxílicos, como o ácido acético, são empregados para modular a polaridade do meio extrator (Chemat; Vian; Cravotto, 2012). O formiato de etila se destaca pela biodegradabilidade e pelo baixo impacto ambiental (Horváth; Anastas, 2007). As cetonas, como a acetona, são eficientes e de rápida evaporação, favorecendo processos industriais sustentáveis (Dai *et al.*, 2013). Em contrapartida os alcanos, como o heptano, são utilizados na extração de compostos lipofílicos devido à sua baixa reatividade química (Clark; Tavener, 2007). A seleção adequada desses solventes verdes é essencial para equilibrar eficiência, seletividade e sustentabilidade nos processos de extração.

A adoção de solventes e tecnologias verdes representa um avanço significativo no campo da extração de compostos bioativos. Além de atender às demandas de eficiência, essas abordagens fortalecem o compromisso com práticas mais sustentáveis e ambientalmente responsáveis, alinhadas aos princípios da economia circular.

2.1.2 Seleção de solventes

A seleção de solventes é um aspecto crítico em processos de extração, separação e purificação. No entanto, deve-se considerar os impactos ambientais, econômicos e de segurança associados aos solventes utilizados. Nesse contexto, os princípios da Química Verde fornecem diretrizes fundamentais para orientar escolhas mais sustentáveis, incluindo a minimização de resíduos, o uso de substâncias menos tóxicas e a eficiência energética (Anastas; Warner, 2000).

A Química Verde busca transformar a maneira como as substâncias químicas são desenvolvidas e utilizadas, priorizando métodos que reduzam os riscos à saúde humana e ao meio ambiente (Gałuszka; Migaszewski; Namieśnik, 2013). Um dos princípios mais relevantes para a seleção de solventes é o quinto, que promove o uso de solventes seguros e, quando possível, sua eliminação total. A escolha inadequada de solventes pode não apenas causar impactos negativos no ambiente, como também comprometer a viabilidade técnica e econômica dos processos.

Apesar das diretrizes oferecidas pela Química Verde, a seleção de solventes enfrenta desafios significativos, especialmente em aplicações que exigem propriedades físico-químicas específicas, como alta seletividade, solubilidade e estabilidade. Além disso, a substituição de solventes tradicionais por alternativas mais sustentáveis requer o equilíbrio entre desempenho técnico e impacto ambiental.

Nessa perspectiva, os modelos termodinâmicos têm se destacado com uma excelente ferramenta de auxílio para a seleção de solventes, devido a sua capacidade de estimar propriedades físico-químicas e prever interações moleculares com alta precisão. Um exemplo notável é o método COSMO-SAC (*COnductor-like Screening Model for Segment Activity Coefficients*), que utiliza simulações quânticas para calcular a solubilidade e outras propriedades relacionadas à interação soluto-solvente.

2.2 TERMODINÂMICA DE SOLUÇÕES

2.2.1 Equilíbrio sólido-líquido

O equilíbrio sólido-líquido (ESL) é um fenômeno termodinâmico que ocorre quando uma substância pura em fase sólida está em equilíbrio com sua fase líquida em determinadas condições de temperatura, pressão e composição. Esse equilíbrio é

regido por princípios fundamentais da termodinâmica, que garantem a estabilidade das fases coexistentes (Prausnitz; Lichtenthaler; Azevedo, 1999). Dessa forma, a compreensão do ESL é essencial para descrever processos de dissolução e precipitação amplamente utilizados em diversos segmentos da indústria química, farmacêutica e alimentícia.

A base teórica para o estudo do ESL reside na análise do potencial químico (μ_i) de cada componente do sistema. O potencial químico é uma propriedade termodinâmica que indica a energia de Gibbs molar parcial de um componente, dependendo das condições do sistema. Para que duas fases, sólida e líquida, estejam em equilíbrio, o potencial químico (μ) de um componente i deve ser igual em ambas as fases (Koretsky, 2013), como expresso pela equação (1):

$$\mu_i^S = \mu_i^L \quad (1)$$

Essa igualdade implica que não há força motriz para a transferência de massa entre as fases sólida (S) e líquida (L) (Koretsky, 2013). Em sistemas reais, o potencial químico pode ser substituído pela fugacidade, uma medida mais prática para descrever o comportamento das fases em equilíbrio. Assim, a condição de equilíbrio é expressa como:

$$f_i^S = f_i^L \quad (2)$$

em que f_i^S e f_i^L são, respectivamente, as fugacidades do componente i nas fases sólida e líquida. A equação (2) é a base para calcular a solubilidade de sólidos em líquidos, considerando as condições específicas de temperatura e pressão (Prausnitz; Lichtenthaler; Azevedo, 1999).

Uma formulação prática para a solubilidade é obtida assumindo que a fase sólida é composta por um único componente puro, e que a fugacidade na fase sólida pode ser substituída por sua dependência termodinâmica. Para a fase líquida, a fugacidade é ajustada para incluir o comportamento não ideal da mistura, geralmente representado pelo coeficiente de atividade (γ_i) do soluto no solvente. A relação final para a solubilidade x_i , que representa a fração molar do soluto na fase líquida, é dada por (Koretsky, 2013):

$$\ln x_i = \frac{\Delta H_f}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_f} \right) - \frac{\Delta C_p}{R} \left(1 - \frac{T_f}{T} - \ln \frac{T}{T_f} \right) - \ln \gamma_i \quad (3)$$

onde x_i é a fração molar do soluto na fase líquida; ΔH_f é a entalpia molar de fusão na temperatura de fusão do sólido (T_f); ΔC_p é a diferença entre a capacidade calorífica

do sólido nas fases líquida e sólida na temperatura de fusão; γ_i é o coeficiente de atividade do soluto em solução; T é a temperatura do sistema e R é a constante universal dos gases.

Para o caso particular em que as diferenças da capacidade calorífica entre as diferentes fases são pequenas, resulta-se na seguinte formulação simplificada (Koretsky, 2013) e representada pela equação (4):

$$\ln x_i = \frac{\Delta H_f}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_f} \right) - \ln \gamma_i \quad (4)$$

Desta forma o comportamento não ideal do sistema é particularmente importante em sistemas onde as interações intermoleculares entre o soluto e o solvente não seguem o comportamento ideal previsto. Os Modelos termodinâmicos podem ser amplamente utilizados para ajustar esses desvios e prever o comportamento do sistema em condições específicas.

2.2.2 Fugacidade e coeficiente de atividade

A fugacidade (f_i) e o coeficiente de atividade (γ_i) são conceitos fundamentais na termodinâmica de soluções e misturas, permitindo a descrição de sistemas nos quais as interações intermoleculares entre os componentes não podem ser negligenciadas.

Introduzida em 1901, por Gilbert N. Lewis, a fugacidade pode ser entendida como a tendência de escape de um componente de uma fase para outra, assim sendo uma “pressão efetiva” que leva em conta as interações entre moléculas, podendo ser definida pela equação (5):

$$\mu_i - \mu_i^0 = RT \ln \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^0} \quad (5)$$

em que μ_i corresponde ao potencial químico do componente; μ_i^0 o potencial químico em um estado de referência; $\hat{f}_i$ fugacidade do componente i quando em mistura; $\hat{f}_i^0$ fugacidade no estado de referência (Koretsky, 2013).

Para sistemas ideais, a fugacidade é igual à pressão parcial do componente, no caso de sistemas reais, os desvios da idealidade são corrigidos pelo coeficiente de fugacidade (ϕ_i), definido como (Prausnitz; Lichtenthaler; Azevedo, 1999):

$$\phi_i = \frac{\hat{f}_i}{Py_i} \quad (6)$$

no qual P é a pressão total do sistema e y_i é a fração molar do componente i na fase gasosa.

Já o coeficiente de atividade é a medida da não idealidade em soluções líquidas e sólidas, que se baseia na relação entre a fugacidade do comportamento de uma espécie química i em uma solução real ($\hat{f}_i$) e sua fugacidade em uma solução ideal ($\hat{f}_i^{ID}$) (Koretsky, 2013):

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{ID}} \quad (7)$$

Em uma solução ideal, as interações entre moléculas do soluto e do solvente são iguais às interações entre moléculas do solvente entre si, resultando em $\gamma_i = 1$. Entretanto, em soluções reais, diferenças nas interações moleculares podem levar a $\gamma_i > 1$, indicação de repulsão entre as moléculas, ou $\gamma_i < 1$, indicação de atração.

O coeficiente de atividade está diretamente relacionado à energia de Gibbs em excesso (G^E), que é uma propriedade que quantifica a diferença entre a energia de Gibbs de uma solução real e a de uma solução ideal nas mesmas condições de temperatura e pressão. A relação entre o coeficiente de atividade e a energia de Gibbs pode ser expressa na forma intensiva (Koretsky, 2013):

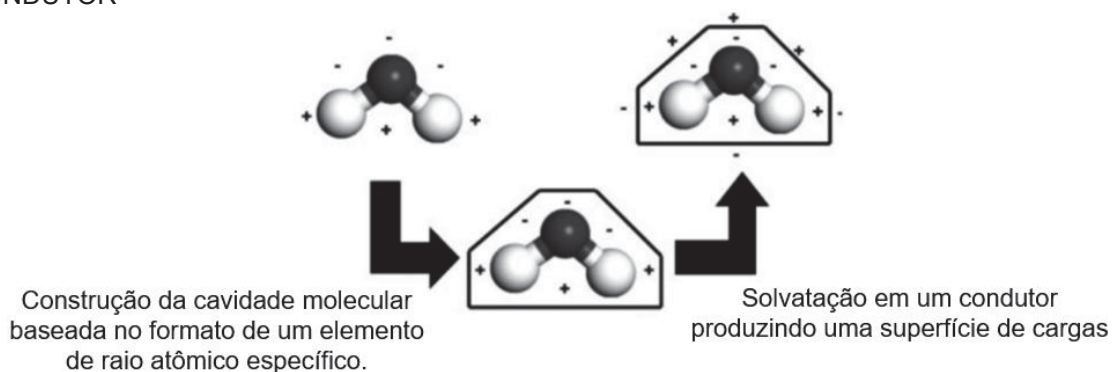
$$G_i^E = RT \ln \gamma_i \quad (8)$$

Para estimar os coeficientes de atividade em sistemas complexos, diversos modelos termodinâmicos foram desenvolvidos. Entre os modelos mais conhecidos estão Margules, Wilson, NRTL e UNIQUAC, UNIFAC, esses modelos baseiam-se em parâmetros experimentais e contribuições de grupos funcionais, permitindo prever o comportamento de misturas em diversas condições (Prausnitz; Lichtenthaler; Azevedo, 1999). Além disso, modelos mais modernos, como COSMO-RS e COSMO-SAC, utilizam cálculos quânticos para estimar propriedades moleculares e, consequentemente, coeficientes de atividade, reduzindo a dependência de dados experimentais (Lin; Sandler, 2002).

2.3 MODELO COSMO-SAC

O modelo COSMO (*COnductor-like Screening Model*), introduzido por Klamt e Schüürmann em 1993, é a base do COSMO-SAC (*COnductor-like Screening Model for Segment Activity Coefficients*) proposto por Lin & Sandler, (2002). Nesta abordagem as moléculas são modeladas como cavidades em um condutor perfeito, onde o campo elétrico no interior é anulado por cargas induzidas na superfície. Essas cargas são calculadas a partir de cálculos quânticos de densidade eletrônica. Esse processo permite obter a blindagem eletrostática da molécula, que é posteriormente utilizada para estimar interações intermoleculares.

FIGURA 1 - REPRESENTAÇÃO DA BLINDAGEM SOFRIDA PELAS MOLÉCULAS EM UM CONDUTOR



FONTE: Adaptado de Mullins et al., (2006).

Como representado na figura 1, no processo de solvatação, o soluto é inicialmente colocado no solvente com suas cargas desativadas. Esta etapa corresponde à formação de uma cavidade com o volume necessário para acomodar a molécula. Desse processo obtém-se a energia livre de formação de cavidade (ΔG_{cav}^*), que é determinada pelas interações repulsivas entre a partícula e o solvente. Na etapa seguinte, as cargas do soluto são ativadas, dessa forma, passa-se a considerar as interações com as moléculas do solvente. Em paralelo a etapa anterior, é caracterizada pela energia livre de carga (ΔG_{chg}^*) (Lin; Sandler, 1999).

Portanto, a energia livre total de solvatação (ΔG_{sol}^*) é a soma dos termos descritos anteriormente, que englobam interações de Van de Walls, a dispersão e a formação da cavidade, além de interações eletrostáticas e de polarização (Lin; Sandler, 2002):

$$\Delta G_{sol}^* = \Delta G_{cav}^* + \Delta G_{chg}^* \quad (9)$$

O coeficiente de atividade no modelo COSMO é obtido pela combinação de contribuições combinatorial e residual, conforme descrito por Lin & Sandler, (2002). O termo combinatorial considera o tamanho e a forma das moléculas, sendo expresso pela equação de Staverman-Guggenheim, (10):

$$\ln \gamma_i^{comb} = \ln \left(\frac{\phi_i}{x_i} \right) + \frac{z}{2} q_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\phi_i} \right) + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (10)$$

onde ϕ_i e θ_i são as frações volumétricas e superficial, respectivamente;

$$\phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (11)$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (12)$$

os parâmetros r e q representam o volume e a área de superfície de moléculas puras; z é o número de coordenação; l_i o parâmetro geométrico relacionado à forma da molécula:

$$l_j = \frac{z}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1) \quad (13)$$

O termo residual reflete as interações entre segmentos de diferentes densidades de carga, assim no modelo COSMO-SAC, cada molécula contém n_i segmentos de superfície:

$$n_i = \frac{A_i}{\alpha_{eff}} \quad (14)$$

onde A_i é a área de superfície da molécula i e α_{eff} é a área de superfície do segmento padrão. Em que, cada segmento é determinado por sua densidade de carga na superfície:

$$\sigma_m = \frac{q_{avg}}{\alpha_{eff}} \quad (15)$$

sendo q_{avg} é a densidade média de carga de blindagem. Em paralelo, a probabilidade de encontrar um segmento m com uma densidade de carga de superfície (σ_m) em líquido puro i :

$$p_m^i = \frac{n_m^i}{n^i} = \frac{A_m^i}{A^i} \quad (16)$$

no qual n_m^i é o número de segmentos com densidade de carga (σ_m) em uma única molécula i . Já para o caso de probabilidade de um segmento com a densidade de carga em uma mistura é a soma ponderada dos perfis sigma de todos os componentes (Lin; Sandler, 2002):

$$p_m^s = \frac{\sum_i x_i n_i p_m^i}{\sum_i x_i n_i} = \frac{\sum_i x_i A_i p_m^i}{\sum_i x_i A_i} \quad (17)$$

Dessa forma, a equação para o coeficiente de atividade residual no COSMO-SAC é obtida por:

$$\ln \gamma_i^{res} = n^i \sum_m p_m^i (\ln \Gamma_m^s - \ln \Gamma_m^i) = \sum_m n_m^i (\ln \Gamma_m^s - \ln \Gamma_m^i) \quad (18)$$

onde p_m^i é a probabilidade de encontrar o segmento m na molécula i ; Γ_m é o coeficiente de atividade do segmento, determinado por:

$$\ln \Gamma_m^{(s|i)} = -\ln \left[\sum_n p_n^{(s|i)} \Gamma_n^{(s|i)} \exp \left(\frac{-\Delta W_{mn}}{RT} \right) \right] \quad (19)$$

onde ΔW_{mn} corresponde à energia de interação entre o segmento m com σ_m e o segmento n com σ_n (Lin; Sandler, 2002).

O modelo COSMO-SAC se destaca por não depender de parâmetros específicos de interação molecular para misturas, embora exija a estimativa de alguns parâmetros globais, válidos para diferentes sistemas. Essa característica o torna amplamente aplicável e eficiente, sobretudo em situações em que os dados experimentais são limitados. Enquanto o UNIFAC discretiza as moléculas em grupos funcionais e utiliza interações parametrizadas experimentalmente, o COSMO-SAC divide as moléculas em segmentos de carga e utiliza fundamentos de termodinâmica estatística e mecânica quântica para calcular as interações, conferindo ao modelo um forte caráter preditivo (Gerber & Soares, 2010; Yan, 2024).

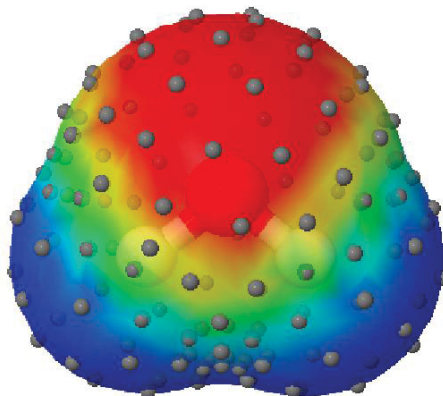
2.3.1 Perfil- σ

Como descrito na seção 2.3 a abordagem do método consiste, na utilização de cálculos de química quântica para representar moléculas em um condutor ideal, permitindo estimar a densidade de cargas na superfície molecular. Assim, esta informação é posteriormente convertida em perfis- σ , que caracterizam a distribuição probabilística de densidades de carga em segmentos moleculares.

O perfil- σ é a representação gráfica essencial nos modelos COSMO, como o COSMO-SAC, e descreve a distribuição de densidades de carga ao longo da superfície molecular de um composto como representado na figura 2. Essa abordagem baseia-se na discretização da superfície acessível ao soluto em segmentos, cada um com uma densidade de carga constante (σ), calculada a partir

de métodos quânticos do modelo COSMO (Klamt, 1995). Essa representação permite capturar de forma precisa as interações intermoleculares, fundamentais para prever propriedades termodinâmicas de misturas.

FIGURA 2 – PONTOS DA SUPERFÍCIE COM CARGAS INDUZIDAS PARA MOLÉCULA DE ÁGUA DISCRETIZADA EM SEGMENTOS.



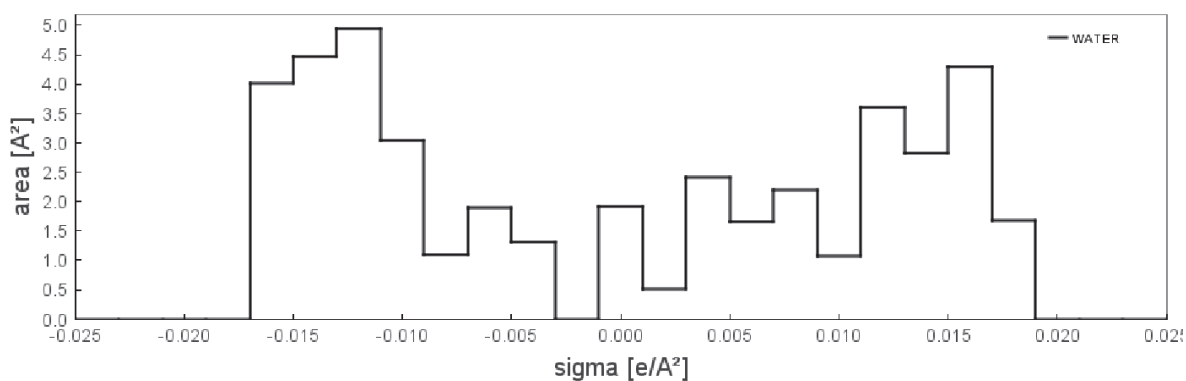
FONTE: Gerber & Soares, (2010).

Matematicamente, o perfil- σ é construído com base nas frações de área de segmentos com diferentes densidades de carga, dadas por:

$$\theta_m = \frac{\sum_i x_i Q_{i,m}}{\sum_j x_j q_j}, \quad (20)$$

onde $x_{i|j}$ é a fração molar do componente i ou j ; $Q_{i,m}$ é a área do segmento m na superfície da molécula i ; q_j é a área total da superfície da molécula j (Wang, Shu *et al.*, 2009).

FIGURA 3 – REPRESENTAÇÃO DA SUPERFÍCIE DE CARGAS INDUZIDAS PARA MOLÉCULA DE ÁGUA DISCRETIZADA EM SEGMENTOS.

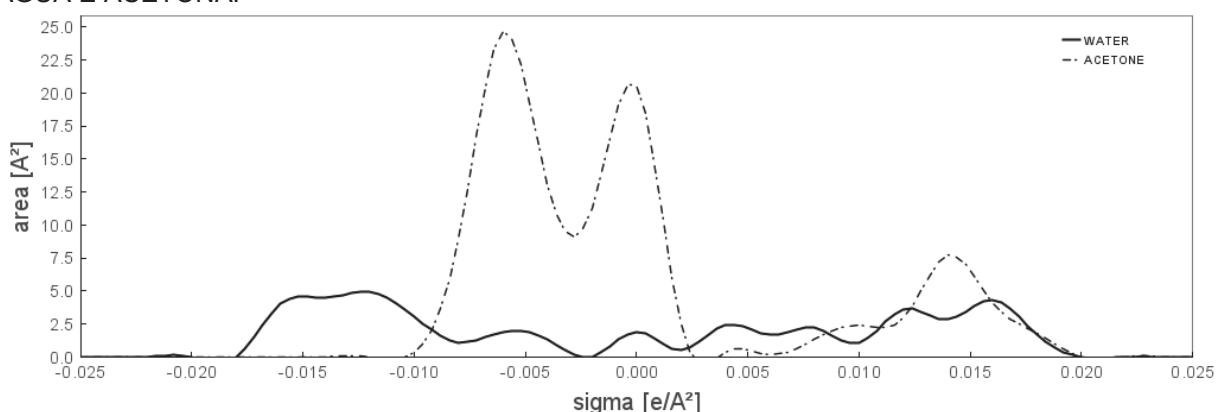


FONTE: Gerber & Soares, (2010).

Usualmente o perfil- σ é representado por um histograma que relaciona as densidades de carga superficial (σ) aos segmentos correspondentes da molécula, como demonstrado na figura 3. Essa representação gráfica permite compreender como as regiões da superfície molecular interagem com outras moléculas na mistura, sendo uma ferramenta fundamental para calcular propriedades termodinâmicas como coeficientes de atividade. Os segmentos com densidades de carga semelhantes apresentam maior probabilidade de interagir, tornando o perfil- σ um elemento-chave na previsão de equilíbrios de fase e outras propriedades relacionadas (Camargo, 2022).

Além disso, o perfil- σ oferece informações qualitativas detalhadas sobre a polaridade molecular. Regiões altamente polares aparecem como picos acentuados de densidade de carga elevada, enquanto áreas apolares apresentam valores próximos de zero (Lin; Sandler, 2002). Tomando como exemplo a molécula de água, nota-se que devido à sua capacidade de doar e aceitar ligações de hidrogênio, exibe um perfil- σ com picos significativos em ambas as extremidades da densidade de carga. Por outro lado, a acetona, predominantemente aceitadora de ligações de hidrogênio, possui um perfil mais assimétrico, com picos destacados na região negativa, associados ao oxigênio da carbonila (Camargo, 2022). Como possível observar ambos os comportamentos na figura 4.

FIGURA 4 – REPRESENTAÇÃO DA SUPERFÍCIE DE CARGA INDUZIDA PARA AS MOLÉCULAS DE ÁGUA E ACETONA.



FONTE: Gerber & Soares, (2010).

O perfil- σ possui uma aplicabilidade preditiva notável em sistemas complexos, uma vez que o modelo COSMO-SAC utiliza a soma ponderada dos perfis- σ de todos

os componentes presentes na mistura. Isso permite prever interações moleculares sem a necessidade de dados experimentais específicos (Gerber & Soares, 2010).

Apesar de sua eficácia, o perfil- σ enfrenta desafios quando aplicado a compostos com estruturas altamente complexas ou quando as identidades moleculares são desconhecidas. Nestes casos, pode ser necessário recorrer a ajustes baseados em dados experimentais ou à criação de perfis- σ "aparentes", que representam o comportamento coletivo de moléculas estruturalmente similares. Essas estratégias permitem ampliar a aplicabilidade do modelo mesmo em cenários mais desafiadores (Wang et al., 2009; Gerber & Soares, 2010).

2.4 INTEGRAÇÃO ENTRE MODELOS TERMODINÂMICOS E ABORDAGENS COMPUTACIONAIS

Mais recentemente, modelos baseados em cálculos quânticos, como COSMO-RS e COSMO-SAC, têm se destacado por estimar propriedades moleculares a partir da distribuição de cargas na superfície dos solutos, permitindo prever coeficientes de atividade e de partição com menor dependência de dados experimentais (Lin; Sandler, 2002). Esses modelos representam um avanço relevante, pois unem princípios da mecânica quântica à termodinâmica, ampliando significativamente a capacidade preditiva em sistemas complexos.

Entretanto, mesmo com os progressos obtidos por essas abordagens moleculares, desafios ainda persistem, especialmente na modelagem de sistemas multicomponentes, em ampla faixa de composições e condições operacionais. A disponibilidade limitada de dados experimentais confiáveis para calibração e validação também restringe o desempenho desses modelos em determinadas aplicações.

Diante desse cenário, a incorporação de técnicas de Inteligência Artificial (IA) e aprendizado de máquina surge como um caminho complementar e promissor. Essas ferramentas oferecem alto poder de generalização e habilidade para identificar padrões não lineares em grandes conjuntos de dados, potencializando a predição de propriedades e a otimização de processos na engenharia química e de alimentos.

2.4.1 Inteligência artificial aplicada à engenharia química e de alimentos

A inteligência artificial (IA) tem se consolidado como uma das principais ferramentas tecnológicas no avanço da engenharia química e de alimentos. Na indústria, sua aplicação abrange desde a automação de processos e o auxílio à tomada de decisão até a redução de custos experimentais, otimização de parâmetros e previsão de propriedades. Sua capacidade de lidar com grandes volumes de dados experimentais e industriais permite a identificação de padrões complexos, muitas vezes imperceptíveis aos métodos convencionais, como análises estatísticas univariadas, ajustes de regressão linear simples ou mesmo modelos empíricos que não conseguem capturar interações não lineares entre variáveis. Esse diferencial amplia as possibilidades de inovação, tornando a IA um recurso estratégico para enfrentar os desafios atuais relacionados à eficiência, sustentabilidade e segurança dos alimentos (Yang, Xin et al., 2025; Kravchenko et al., 2025; Gao et al., 2025).

No setor de alimentos, a IA já tem impacto direto em aplicações diversas. Modelos de aprendizado de máquina vêm sendo empregados para a previsão da solubilidade de diferentes compostos em um amplo espectro de solventes, contribuindo para a escolha de condições experimentais mais adequadas e sustentáveis (Mu et al., 2024; Liu, Bin et al., 2025; Mac Fhionnlaoich et al., 2024).

Um dos campos em que a IA já apresenta impacto concreto é o controle de qualidade e segurança dos alimentos. Modelos de aprendizado têm sido aplicados para prever a qualidade da carne suína durante o armazenamento, com estimativas precisas de pH e alterações de cor, fatores determinantes para a aceitação do produto (Yang, Xidi et al., 2025). Do mesmo modo, técnicas baseadas em espectroscopia associadas ao *machine learning* têm sido usadas para identificar adulterações em ingredientes alimentícios, como a quantificação de sacarina sódica em rações para animais de estimação, demonstrando a versatilidade dos algoritmos em diferentes contextos (Wang, Zhangting et al., 2025).

Além da qualidade, a IA vem sendo aplicada na otimização da extração de compostos bioativos, com destaque para o uso de solventes verdes e biodegradáveis. Modelos de aprendizado permitem prever o desempenho de diferentes combinações de solventes e condições operacionais, reduzindo a necessidade de testes experimentais extensivos e o consumo de reagentes muitas vezes tóxicos ou de difícil

obtenção (Gao *et al.*, 2025). Essa aplicação reforça o papel da IA na promoção de processos mais limpos e alinhados aos princípios da economia circular.

É importante destacar, entretanto, que a IA não substitui os modelos físico-químicos clássicos, pelo contrário, atua como ferramenta complementar, capaz de corrigir desvios, aumentar a acurácia preditiva e expandir a aplicabilidade desses modelos em sistemas complexos. Assim, a integração entre fundamentos termodinâmicos e algoritmos de aprendizado de máquina representa um avanço metodológico que une rigor científico e flexibilidade computacional, fortalecendo o desenvolvimento sustentável nas engenharias química e de alimentos.

2.4.2 Conceitos básicos de *machine learning*

O *machine learning* é um ramo da inteligência artificial que utiliza algoritmos capazes de aprender com dados para identificar padrões e realizar previsões, sem necessidade de regras definidas manualmente (IBM, 2025; Brown S, 2021). Essa capacidade de adaptação o torna especialmente útil para lidar com sistemas complexos e não lineares, comuns na engenharia química e de alimentos, onde auxilia no controle de qualidade, segurança e otimização de processos (Gao *et al.*, 2025; Zhang *et al.*, 2025).

Os principais paradigmas do ML incluem o aprendizado supervisionado, que utiliza dados rotulados para prever variáveis conhecidas (ex.: pH e cor de carnes); o não supervisionado, voltado à descoberta de padrões em dados não rotulados (ex.: agrupamento de perfis microbianos); e o por reforço, usado no controle dinâmico de processos (Yang, Xidi *et al.*, 2025) (Okoye *et al.*, 2025).

Entre os algoritmos mais aplicados destacam-se árvores de decisão, florestas aleatórias e máquinas de vetor de suporte, que são rápidos e interpretáveis, mas menos eficazes em sistemas altamente complexos. Já as redes neurais artificiais, especialmente as de aprendizado profundo (deep learning), oferecem maior precisão ao reconhecer padrões complexos, embora exijam grandes volumes de dados e alto poder computacional (IBM, 2025; Brown S, 2021).

O desempenho dos modelos depende fortemente da qualidade dos dados e do ajuste de hiperparâmetros, fatores que influenciam fenômenos como *overfitting* (excesso de ajuste) e *underfitting* (baixa capacidade preditiva). Além disso, a interpretabilidade dos modelos é um desafio importante: enquanto métodos simples

permitem rastrear as variáveis mais influentes, arquiteturas profundas tendem a se comportar como “caixas-pretas”. Por isso, cresce o interesse em técnicas que tornem os modelos mais transparentes e confiáveis (Ahmed; Ahmed; Kamruzzaman, 2025; Sari et al., 2025)

Assim, o machine learning amplia as possibilidades de previsão e otimização em sistemas químicos e alimentícios, desde tarefas simples, como estimar solubilidade, até problemas complexos, como modelar a estabilidade de compostos bioativos. A escolha do algoritmo, contudo, deve equilibrar desempenho, interpretabilidade e disponibilidade de dados, garantindo resultados cientificamente robustos e aplicáveis na prática.

2.4.3 Regressão por Processos Gaussianos (GPR)

A Regressão por Processos Gaussianos (GPR, do inglês *Gaussian Process Regression*) é uma técnica de aprendizado supervisionado para problemas de regressão, cujo objetivo é prever valores contínuos a partir de variáveis de entrada conhecidas. Diferentemente de métodos paramétricos, como regressão linear, a GPR é um modelo não paramétrico e probabilístico, o que significa que não assume uma forma funcional fixa para a relação entre entrada e saída. Em vez disso, define uma distribuição de probabilidade sobre funções, permitindo maior flexibilidade para representar relações complexas e não lineares (Rasmussen; Williams, 2006).

Um processo gaussiano é completamente especificado por uma função média $m(x)$ e uma função de covariância $k(x, x')$:

$$f(x) \sim GP(m(x), k(x, x')) \quad (21)$$

onde:

$m(x) = \mathbb{E}[f(x)]$ corresponde a média das funções, frequentemente assumida como zero;

$k(x, x') = \mathbb{E}[(f(x) - m(x))(f(x') - m(x'))]$ define o grau de similaridade entre pontos x e x' , sendo denominado como *kernel*.

A etapa de predição na GPR combina os pontos de treinamento com a função de covariância, resultando em uma distribuição preditiva para um novo ponto x_* :

$$\bar{f}_* = k_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} y \quad (22)$$

$$Var(f_*) = k(x_*, x_*) - k_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} k_* \quad (23)$$

em que K é a matriz de covariância entre os pontos de treinamento, k_* é o vetor de covariâncias entre x_* e os pontos de treinamento, σ_n^2 é a variância do ruído e y é o vetor de valores observados. A equação (22) fornece a média predita, estimativa pontual, enquanto a (23) fornece a variância predita, que expressa a incerteza associada à previsão, um diferencial importante da GPR.

No presente trabalho foi utilizado o *kernel* RBF (*Radial Basis Function*), também chamado de *squared exponential kernel*, cuja forma geral é dada por:

$$k(x, x') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\|x - x'\|^2}{2l^2}\right) \quad (24)$$

onde σ_f^2 é a variância do processo e l é o comprimento de correlação (*length-scale*), que controla o grau de suavidade da função. Este kernel é amplamente utilizado por sua capacidade de gerar funções suaves e bem-comportadas, sendo adequado para capturar relações complexas em dados de natureza contínua, como descrito por Görtler e colaboradores, (2019).

O modelo gaussiano também oferece vantagens comparativas quando aplicada ao refinamento de dados. Como descrito por Ouyang e colaboradores, (2023), o GPR lida bem com problemas complexos de regressão com amostras pequenas e muitas variáveis, o que reforça sua utilidade em sistemas onde experimentação é cara ou limitada.

Essas características fazem com que a regressão por processos gaussianos seja especialmente útil em cenários onde os dados experimentais são escassos ou de difícil obtenção, mas em que a confiabilidade das previsões é essencial (Rasmussen; Williams, 2006; Liu, Haitao et al., 2019). No contexto deste trabalho, a GPR se mostrou adequada para refinar os resultados obtidos pelo modelo COSMO-SAC, reduzindo desvios em relação aos valores experimentais e proporcionando um modelo híbrido mais preciso e confiável, capaz de auxiliar na tomada de decisão em contextos industriais e de pesquisa.

2.4.4 Interpretabilidade do aprendizado de máquina

A interpretabilidade dos modelos de aprendizado de máquina constitui um desafio central para sua aplicação em áreas científicas e industriais. Modelos complexos, como redes neurais profundas, podem atingir alta acurácia preditiva,

porém muitas vezes são vistos como "caixas-pretas", dificultando a compreensão de como cada variável de entrada contribui para a previsão final (Molnar, 2025).

Nesse contexto, os valores SHAP (*SHapley Additive exPlanations*) têm se destacado como uma das abordagens mais robustas e consistentes para explicar modelos de aprendizado de máquina. O método é fundamentado na teoria dos valores de Shapley, proveniente da teoria dos jogos cooperativos, em que cada variável é interpretada como um "jogador" que contribui para o resultado do modelo. A contribuição de cada variável é calculada como sua contribuição marginal média em todas as combinações possíveis de variáveis, garantindo uma medida de importância consistente e aditiva (Lundberg; Lee, 2017; Molnar, 2025).

Matematicamente, o valor SHAP de uma variável i é dado por:

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq F \setminus \{i\}} \frac{|S|! (|F| - |S| - 1)!}{|F|!} [f(S \cup \{i\}) - f(S)] \quad (25)$$

em que:

ϕ_i corresponde ao valor SHAP da variável i ;

F é o conjunto de todas as variáveis de entrada;

S é o subconjunto de variáveis que não contém a variável i .

A formulação (25) garante propriedades desejáveis como eficiência, simetria e aditividade, tornando o SHAP uma ferramenta poderosa para interpretar modelos complexos de forma quantitativa. Na prática, isso permite identificar quais variáveis têm maior impacto no resultado, além de avaliar a direção, aumento ou redução, da contribuição de cada uma delas para cada previsão individual.

2.5 ESTADO DA ARTE

Os modelos termodinâmicos do tipo COSMO, têm sido amplamente aplicados na previsão de propriedades de equilíbrio. Baseados em fundamentos de química quântica, esses modelos oferecem uma forma sistemática de estimar interações soluto-solvente sem depender exclusivamente de dados experimentais extensivos (Mac Fhionnlaoich et al., 2024; Mu et al., 2024). No entanto, apesar de sua utilidade, apresentam limitações importantes quando aplicados a sistemas mais complexos, como soluções altamente polares, líquidos iônicos ou solventes eutéticos profundos. Nessas situações, são comuns desvios significativos em relação aos valores

experimentais, o que compromete a confiabilidade de suas previsões e restringe sua aplicabilidade prática (Liu, Bin et al., 2025; Fu et al., 2025).

A inteligência artificial tem se consolidado como uma das principais ferramentas tecnológicas, na indústria, sua aplicação abrange desde a automação de processos e o auxílio à tomada de decisão até a redução de custos experimentais, otimização de parâmetros e previsão de propriedades. Sua capacidade de lidar com grandes volumes de dados experimentais e industriais permite a identificação de padrões complexos, muitas vezes imperceptíveis aos métodos convencionais, como análises estatísticas univariadas, ajustes de regressão linear simples ou mesmo modelos empíricos que não capturam interações não lineares entre variáveis (Yang, Xidi et al., 2025; Kravchenko *et al.*, 2025; Gao *et al.*, 2025).

Assim tem crescido o interesse na combinação de modelos termodinâmicos com técnicas de *machine learning*. Essa integração parte da ideia de que os descritores moleculares derivados do COSMO, como perfis de carga superficial (σ -profiles) e parâmetros de energia de interação, podem servir como variáveis de entrada para algoritmos de aprendizado de máquina capazes de capturar relações não lineares complexas. Com isso, não apenas se aumenta a precisão das previsões, mas também se reduz a dependência de longas séries experimentais, aspecto fundamental em sistemas de difícil caracterização (Mac Fhionnlaoich et al., 2024; Jin et al., 2025).

Diversos estudos já demonstram os benefícios dessa abordagem híbrida. No caso da captura de CO₂, por exemplo, modelos que integram o COSMO a algoritmos como *random forest* ou métodos de *ensemble learning* alcançaram desempenho significativamente superior ao dos modelos puramente termodinâmicos, permitindo prever solubilidade em diferentes aminas e solventes eutéticos com elevada exatidão (Liu, Bin et al., 2025; Wang, Zhangting et al., 2025). Situação semelhante é observada em sistemas contendo gases como N₂ ou compostos fluorados dissolvidos em líquidos iônicos, nos quais técnicas como *gradient boosting* e redes neurais artificiais têm superado amplamente os métodos tradicionais, atingindo coeficientes de determinação próximos a 0,99 (Zhao et al., 2025; Tian et al., 2024).

Em outra vertente, estudos sobre solubilidade aquosa de compostos bioativos e farmacêuticos têm apontado que a associação de COSMO-RS com algoritmos como a Regressão por Processos Gaussianos ou redes neurais profundas permite reduzir o erro médio das previsões, mesmo quando se dispõe de bases de dados

relativamente pequenas (Mac Fhionnlaoich et al., 2024; Fu et al., 2025). Já em sistemas envolvendo hidrocarbonetos e acetileno, modelos híbridos do tipo mecanismo-dados mostraram não apenas ganhos em precisão, mas também maior consistência com as leis termodinâmicas, mesmo em cenários de dados limitados (Mahdi; Obaidullah, 2024).

Esses avanços evidenciam que a integração entre modelos físico-químicos e *machine learning* não se restringe a ganhos numéricos de desempenho, mas também possibilita análises mais interpretáveis. Essa abordagem permite quantificar a contribuição de cada variável de entrada derivada do COSMO, como perfis de carga superficial, parâmetros de interação ou áreas de contato molecular, na previsão da solubilidade, oferecendo uma interpretação clara do que sustenta o resultado. Com isso, torna-se possível identificar quais características estruturais do soluto ou do solvente exercem maior influência no processo, fornecendo *insights* valiosos sobre o papel de grupos funcionais específicos e sobre a natureza das interações moleculares envolvidas (Liu, Bin et al., 2025).

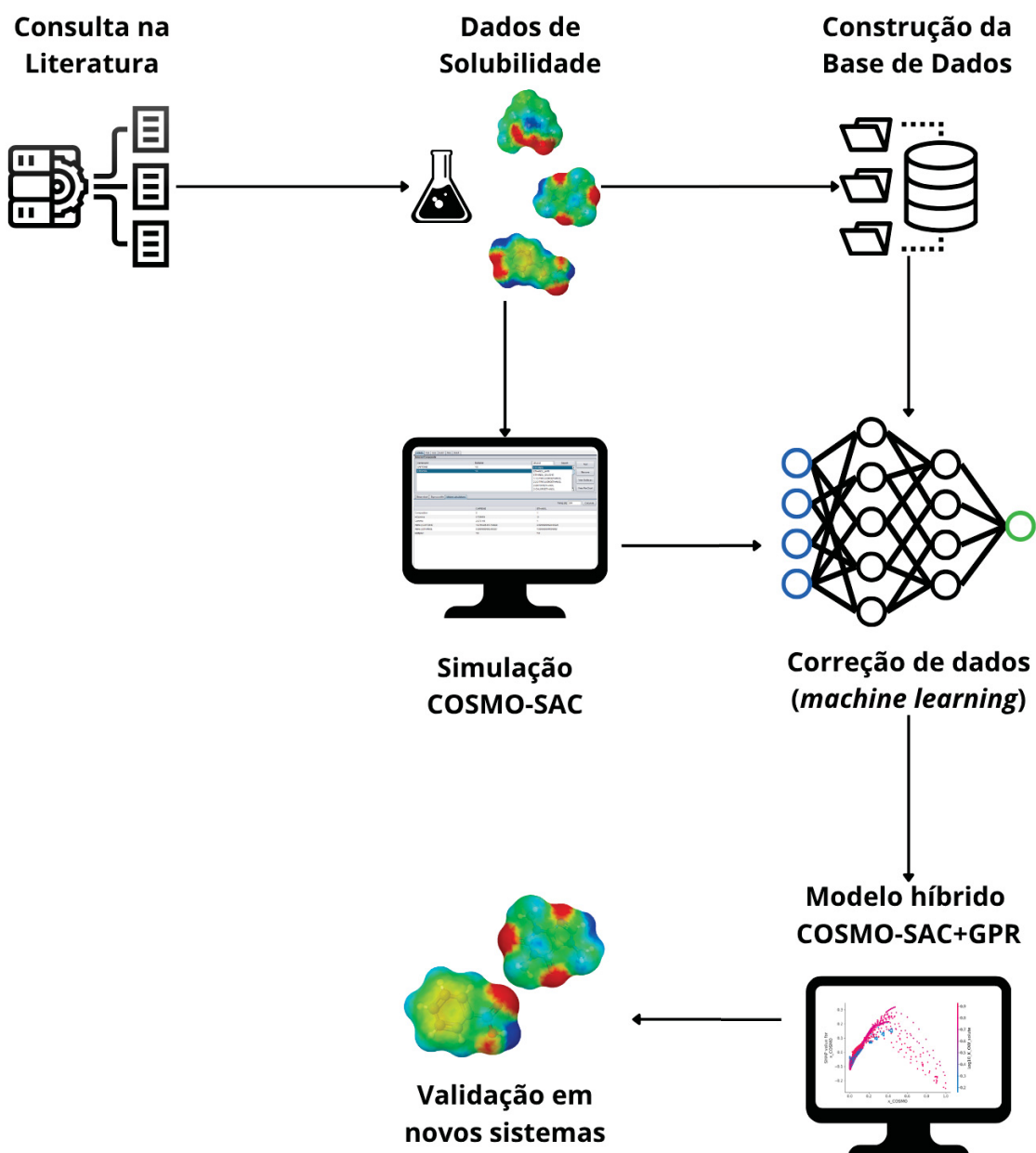
Não obstante estes avanços, desafios ainda persistem. A qualidade e a representatividade dos dados continuam sendo fatores críticos para o desempenho dos modelos; algoritmos mais complexos, como as redes neurais profundas, permanecem sob a crítica de atuarem como sistemas pouco transparentes; e a extrapolação para solventes não contemplados no treinamento segue como uma limitação importante (Gao et al., 2025; Yang, Xidi et al., 2025).

A tendência apontada pela literatura é clara: a integração de abordagens mecanismo-dados, que unem os fundamentos físico-químicos do COSMO-RS e do COSMO-SAC à flexibilidade de algoritmos de *machine learning*, representa uma estratégia promissora. Esse caminho abre novas perspectivas para o projeto de solventes verdes, para a modelagem da solubilidade de bioativos e para a análise de sistemas complexos em que os métodos tradicionais falham (Zhao et al., 2025; Wang, Guangle et al., 2020; Zhao et al., 2025). Assim, o Estado da Arte demonstra que a sinergia entre modelos termodinâmicos e aprendizado de máquina não apenas melhora a capacidade preditiva, mas também contribui para o desenvolvimento de processos mais eficientes, sustentáveis e inovadores.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo são descritas as etapas realizadas para a construção da base de dados, modelagem termodinâmica, desenvolvimento do modelo híbrido COSMO-SAC+GPR e análise de interpretabilidade. O procedimento metodológico está resumido no fluxograma da figura 5, o qual apresenta o encadeamento das atividades realizadas nesta pesquisa.

FIGURA 5 - FLUXOGRAMA DA METODOLOGIA EMPREGADA NO ESTUDO



FONTE: O Autor, (2025).

3.1 BASE DE DADOS

A construção dessa base teve como princípio a integração entre informações experimentais, obtidas diretamente da literatura científica, e parâmetros teóricos derivados do modelo COSMO-SAC. Assim, buscou-se reunir em um único conjunto dados consistentes e representativos, capazes de sustentar tanto a avaliação do modelo termodinâmico quanto sua integração com métodos de *machine learning*, contemplando compostos selecionados por sua relevância nas áreas de alimentos, fármacos e cosméticos, entre eles carotenoides, fenóis e derivados aromáticos, que são reconhecidos pelo valor agregado e pela dificuldade de modelagem de suas propriedades e determinação de sua solubilidade.

Para cada soluto, foram coletados valores experimentais de fração molar de equilíbrio (x_{exp}) composição dos solventes (x_i), contemplando desde sistemas convencionais, como água e etanol, até misturas binárias e solventes alternativos de interesse em processos sustentáveis. Além disso, foram registradas as condições de temperatura (T) reportadas nos trabalhos originais, assegurando a comparabilidade termodinâmica entre os diferentes conjuntos de dados. De forma complementar, foram incorporadas informações teóricas obtidas por meio do código em *Python* integrado ao software JCOSMO, incluindo o logaritmo do coeficiente de partição n-octanol/água do soluto ($\log K_{OW,soluto}$). Para caracterizar a polaridade das misturas de solventes, calculou-se o c , definido como a média ponderada dos valores de $\log K_{OW}$ individuais de cada solvente, considerando suas respectivas frações molares na solução.

Destaca-se que o parâmetro $WALK_{mix}$ não possui significado físico intrínseco, sendo empregado apenas como descritor auxiliar para caracterizar os solventes no processo de correção via *machine learning* e posterior avaliação do efeito do solvente. De forma análoga, o $\log K_{OW}$ foi utilizado como variável descritiva adicional, servindo para diferenciar o comportamento do soluto.

3.2 MODELAGEM TERMODINÂMICA

Neste trabalho, a modelagem termodinâmica foi conduzida utilizando o modelo COSMO-SAC (COnductor-like Screening Model for Segmented Activity Coefficients), implementado por meio do software JCOSMO (Gerber, Renan P.;

Soares, 2010; Gerber, R. P.; Soares, 2013), disponível gratuitamente (<https://doi.org/10.5281/zenodo.3613786>).

As geometrias moleculares dos solutos e solventes foram previamente otimizadas por cálculos de química quântica no pacote GAMESS (Schmidt *et al.*, 1993), seguindo o protocolo descrito por Ferrarini e colaboradores, (2018). A partir dessas otimizações foram obtidos os denominados perfis sigma (σ -profiles). O modelo empregado incorpora uma parametrização específica para ligações de hidrogênio, denominada GMHB1808 (Gerber, Renan P.; Soares, 2010; Soares, 2011; Soares; Baladão; Staudt, 2019).

A predição das frações molares de equilíbrio dos solutos (x_{cosmo}) foi realizada por meio da resolução da equação (4). Para isso, foi utilizado um procedimento iterativo acoplado ao modelo COSMO-SAC, conforme implementado via JCOSMO. Inicialmente, foi definido valor correspondente de diluição infinita para a fração molar do soluto (x_0), a partir da qual são ajustadas as composições molares dos solventes de forma que sua soma com o soluto respeite a condição de mistura binária ou ternária. Com a composição definida, o modelo calcula logaritmo do coeficiente de atividade do soluto ($\ln \gamma$), em paralelo ao cálculo do valor de x com base na equação de equilíbrio sólido-líquido. O processo é repetido até que a diferença entre valores sucessivos de x seja inferior a uma tolerância numérica de 10^{-10} , garantindo a convergência para uma solução autoconsistente. Os valores finais de x_{cosmo} e foram registrados para análise posterior.

3.3 MODELAGEM COM MACHINE LEARNING

A modelagem de *machine learning* foi realizada por meio da Regressão por Processos Gaussianos utilizando a biblioteca *Scikit-learn* em ambiente *Python*. Os dados foram organizados a partir da base construída na etapa anterior, seção 3.1, contemplando variáveis de entrada como temperatura, coeficiente de partição do soluto ($\log K_{OW,soluto}$), frações molares dos solventes, média ponderada do $\log K_{OW}$ da mistura ($WALK_{mix}$) e solubilidade prevista pelo COSMO-SAC. O valor experimental de solubilidade foi utilizado como variável resposta.

A calibração dos hiperparâmetros do modelo de Regressão por Processos Gaussianos (GPR) foi realizada de forma sistemática para maximizar o desempenho

preditivo do modelo. Inicialmente, todos os atributos de entrada (temperatura, propriedades do soluto e solventes, e a solubilidade prevista pelo COSMO-SAC) e a variável resposta (desvio entre valores previstos e experimentais) foram normalizados para o intervalo de 0 a 1, garantindo que todas as variáveis tivessem a mesma ordem de grandeza e contribuíssem de forma equilibrada no treinamento.

Para a escolha dos hiperparâmetros, variância do sinal (σ_f^2), variância do ruído (σ_n^2) e os comprimentos de correlação individuais (ℓ_i) de cada atributo; empregou-se uma abordagem de otimização global baseada em *Particle Swarm Optimization* (PSO). Essa otimização foi integrada a um esquema de validação cruzada *k-fold* ($k = 5$), no qual o conjunto de dados foi dividido em cinco partes: em cada iteração, quatro partes foram usadas para treinar o modelo e a quinta para validá-lo. O processo foi repetido até que todas as partes fossem utilizadas como conjunto de teste, e o desempenho global foi medido pela média do erro quadrático médio em todas as iterações. O kernel utilizado foi do tipo *Radial Basis Function* (RBF) com comprimento de escala anisotrópico. Assim, foi utilizado um parâmetro de escala independente para cada variável de entrada.

3.4 AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO

A qualidade das previsões foi avaliada a partir de métricas estatísticas aplicadas aos valores experimentais e previstos. Empregou-se três métricas principais: coeficiente de determinação (R^2), raiz do erro quadrático médio e desvio relativo absoluto médio; e complementada pela análise de interpretabilidade com o método *SHapley Additive exPlanations* (SHAP).

3.4.1 Métricas de avaliação estatística

O coeficiente de determinação foi calculado a fim de medir o grau de ajuste entre valores experimentais (x^{exp}) e valores previstos (x^{pred}) pelos modelos. O cálculo foi realizado segundo a seguinte expressão:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (x_i^{exp} - x_i^{pred})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i^{exp} - \bar{x}^{exp})^2} \quad (26)$$

onde x_i^{exp} representa os valores experimentais, x_i^{pred} os valores previstos e $\bar{x}^{exp}$ a média dos valores experimentais.

A raiz do erro quadrático médio (RMSE, do inglês *Root Mean Square Error*) expressa a magnitude do erro médio entre valores experimentais e previstos, penalizando desvios maiores:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i^{exp} - x_i^{pred})^2} \quad (27)$$

O desvio relativo absoluto médio (AARD, do inglês *Average Absolute Relative Deviation*) foi utilizado para quantificar o erro em termos percentuais, calculado por:

$$AARD(\%) = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_i^{exp} - x_i^{pred}}{x_i^{exp}} \right| \quad (28)$$

Essas métricas foram aplicadas de forma sistemática aos dois modelos avaliados: COSMO-SAC isolado e modelo híbrido COSMO-SAC + GPR.

3.4.2 Análise de interpretabilidade SHAP

A interpretabilidade do modelo híbrido foi avaliada por meio do método SHAP (*SHapley Additive exPlanations*). O procedimento foi realizado em *Python*, utilizando a biblioteca SHAP. Inicialmente, foi criado um *explainer* a partir do modelo GPR treinado, o que permitiu calcular os valores de contribuição para cada predição individual. Em seguida, foram gerados gráficos de importância média das variáveis (média do valor SHAP), permitindo avaliar o impacto global de cada descritor na correção realizada pelo modelo. Além disso, foram construídos gráficos-resumo e gráficos de dependência para visualizar a relação entre o valor das variáveis de entrada e sua influência na previsão (Lundberg; Lee, 2017; Molnar, 2025).

3.4.3 Teste de validação do COSMO+GPR para novos sistemas

Foi implementada em *Python* uma função para aplicar o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR a novos sistemas. A função recebe como entradas a temperatura (T), o $\log K_{OW,soluto}$, o $WALK_{mix}$, as frações molares dos solventes (x_1 , x_2) e a solubilidade prevista pelo COSMO-SAC (x_{cosmo}).

Os valores de entrada são normalizados utilizando os limites mínimo e máximo da base de treinamento. Em seguida, o modelo GPR é aplicado para calcular o desvio esperado (Δx) e gerar a solubilidade corrigida (x_{GPR}), dada por:

$$x_{GPR} = x_{COSMO} - \Delta x. \quad (29)$$

Os resultados obtidos na validação foram comparados diretamente entre os valores previstos pelo COSMO-SAC, os corrigidos pelo GPR com os valores de referência da literatura.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 DESCRIÇÃO DA BASE DE DADOS UTILIZADA NO ESTUDO

A base de dados utilizada neste trabalho foi construída a partir da coleta sistemática de valores de solubilidade de diferentes solutos em diversos solventes e misturas binárias, extraídos de artigos científicos indexados em bases como *ScienceDirect*, *SpringerLink* e *Wiley Online Library*.

Para cada sistema, foram registradas a relação soluto-solvente, incluindo fração molar experimental do soluto (x_{exp}) assim como a proporção molar entre os solventes; temperatura experimental (T) reportada em Kelvin (K); o $\log K_{OW}$ calculado pelo COSMO-SAC e a respectiva referência bibliográfica associada ao dado experimental, garantindo a rastreabilidade.

O conjunto final abrangeu 22 solutos de interesse e 42 solventes, incluindo desde compostos clássicos, como água, etanol e acetona, até misturas binárias e solventes alternativos de interesse para química verde. No total, 1950 sistema soluto-solvente foram compilados, cobrindo uma faixa de temperatura de 0 a 90 °C, o que assegura a representatividade térmica do banco de dados e a robustez estatística das análises. Essa diversidade assegura que o modelo seja testado em uma ampla gama de interações moleculares.

A tabela 1 resume a estrutura básica da base de dados e exemplifica um subconjunto representativo dos sistemas estudados, com indicação de soluto, solvente e temperatura experimental. A base detalhada, com informações adicionais, fração molar experimental, o coeficiente de partição do soluto ($\log K_{OW,soluto}$), média ponderada do solvente ($WALK_{mix}$), está contida no Apêndice III.

TABELA 1 - CONJUNTO REPRESENTATIVO DA BASE DE DADOS EXPERIMENTAL

(Continua)

Soluto	Solvente	Faixa de Temperatura (K)
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de n-Butila	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	278,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	273,15–308,15

TABELA 1 - CONJUNTO REPRESENTATIVO DA BASE DE DADOS EXPERIMENTAL

(Continuação)

Soluto	Solvente	Faixa de Temperatura (K)
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	n-Heptano	273,15–308,15
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	273,15–308,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de n-Propila	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	278,15–323,15
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	278,15–323,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de etila	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Dimetilformamida	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	283,15–318,15
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	283,15–318,15
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	288,15–328,15
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol:Água	288,15–328,15
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	288,15–328,15
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol:Água	288,15–328,15
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol:Água	283,15–323,15
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol:Água	283,15–323,15
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol:Água	283,15–323,15
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol:Água	283,15–323,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	283,15–343,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de etila	283,15–343,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	283,15–323,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	283,15–363,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	283,15–343,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	283,15–343,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	283,15–323,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	283,15–353,15
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	283,15–343,15
Artemisinina ⁽⁴⁾	Etanol	278,15–313,15

TABELA 1 - CONJUNTO REPRESENTATIVO DA BASE DE DADOS EXPERIMENTAL

(Continuação)

Soluto	Solvente	Faixa de Temperatura (K)
Artemisinina ⁽⁴⁾	n-Heptano	278,15–313,15
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	278,15–313,15
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	293,20–313,20
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	293,20–313,20
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	293,20–313,20
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	293,20–313,20
Cafeína ⁽⁶⁾	Água	298,15–298,15
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água	298,15–313,15
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água:Etanol	298,15–313,15
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Etanol	298,15–313,15
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	298,15–318,15
Curcumina ⁽⁹⁾	Etanol	298,15
Frutose ⁽¹¹⁾	Água	293,20–323,20
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol	303,20–313,20
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol:Água	293,20–323,20
Lidocaína ⁽⁶⁾	Água	298,15
Naproxeno ⁽¹³⁾	Água	298,15–313,15
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol:Etanol	293,20–313,20
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de etila	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de isopropila	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de n-butila	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formiato de etila	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formiato de metila	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	283,15–323,15
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	283,15–323,15
Piroxicam ⁽¹⁶⁾	Água	303,15–318,15
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol:Etanol	278,15–318,15
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila:Água	298,15–338,15
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido nítrico:Água	298,15–323,15
Sacarose ⁽¹¹⁾	Água	293,20–323,20
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol	303,20–313,20
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol:Água	293,20–323,20
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de etila	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona:Acetato de etila	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona:Etanol	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona:Metanol	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona:Tolueno	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	278,15–318,15
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	278,15–318,15

TABELA 1 - CONJUNTO REPRESENTATIVO DA BASE DE DADOS EXPERIMENTAL

(Conclusão)		
Soluto	Solvente	Faixa de Temperatura (K)
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	298,15–318,15
Taurina ⁽²⁰⁾	Água:1,2-Propilenoglicol	298,15–318,15
Taurina ⁽²⁰⁾	Água:Acetona	298,15–318,15
Taurina ⁽²⁰⁾	Água:Acetonitrila	298,15–318,15
Taurina ⁽²⁰⁾	Água:Etilenoglicol	298,15–318,15
ϵ -Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	278,85–321,55
ϵ -Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	278,85–323,15
ϵ -Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	279,25–321,75
ϵ -Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	283,65–318,35

FONTE: ⁽¹⁾(Mei *et al.*, 2024); ⁽²⁾(Yuan *et al.*, 2025); ⁽³⁾(Wu *et al.*, 2016); ⁽⁴⁾(Wünsche *et al.*, 2024); ⁽⁵⁾(Rezaei *et al.*, 2022); ⁽⁶⁾(Santiago *et al.*, 2023); ⁽⁷⁾(Shayanfar; Velaga; Jouyban, 2014); ⁽⁸⁾(Noubigh; Akremi, 2019); ⁽⁹⁾(Shekaari *et al.*, 2021); ⁽¹⁰⁾(Yang, Jianting *et al.*, 2024); ⁽¹¹⁾(Galvão *et al.*, 2024); ⁽¹²⁾(Zhai *et al.*, 2024); ⁽¹³⁾(Sayari *et al.*, 2022); ⁽¹⁴⁾(Silveira *et al.*, 2023); ⁽¹⁵⁾(Wang, Guangle *et al.*, 2020); ⁽¹⁶⁾(Zhan *et al.*, 2023); ⁽¹⁷⁾(Torres-Cardozo *et al.*, 2023); ⁽¹⁸⁾(Yao *et al.*, 2024); ⁽¹⁹⁾(Kodide; Asadi; Thati, 2022); ⁽²⁰⁾(Gong; Li; Rohani, 2022)

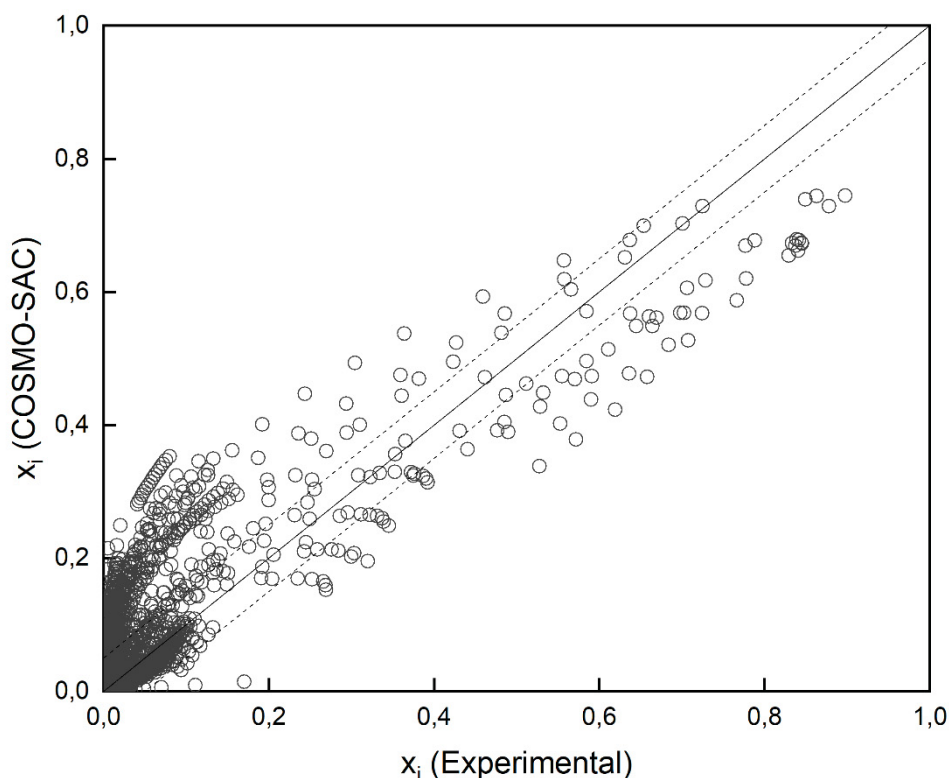
4.2 RESULTADOS DA PREVISÃO OBTIDA VIA COSMO-SAC

O desempenho do modelo COSMO-SAC foi inicialmente avaliado de forma isolada, comparando-se os valores de solubilidade previstos (x^{pred}) com os valores experimentais (x^{exp}) da base de dados. Essa análise possibilitou verificar a capacidade preditiva do modelo sem o auxílio de abordagens complementares. O resultado individual para cada sistema está disponível no Apêndice III.

Na figura 6 apresenta-se a dispersão entre x_{COSMO}^{pred} e x^{exp} . A linha contínua corresponde à linha de identidade (45°), a qual indica o grau de concordância ideal entre valores previstos e observados. As linhas tracejadas representam o intervalo de confiança de $\pm 5\%$, servindo como referência visual para a avaliação da precisão das previsões.

Observa-se que, embora o modelo reproduza satisfatoriamente tendências gerais de solubilidade, há casos em que os desvios são expressivos, sobretudo em sistemas contendo solventes fortemente polares ou misturas complexas. Esses desvios decorrem da dificuldade do COSMO-SAC em capturar interações específicas, como ligações de hidrogênio intensas, efeitos estéricos e interações π - π , que são relevantes em moléculas com grupos funcionais múltiplos ou alta conjugação eletrônica (Chang *et al.*, 2018; Kang; Lee; Kang, 2020; Li *et al.*, 2025).

FIGURA 6 - DISPERSÃO ENTRE VALORES PREVISTOS PELO COSMO-SAC E VALORES EXPERIMENTAIS DE SOLUBILIDADE.



FONTE: O Autor, (2025).

Para quantificar o desempenho, obteve-se as métricas estatísticas apresentadas na tabela 2. Os resultados indicam que o COSMO-SAC apresenta bom ajuste para moléculas pequenas e de baixa polaridade, como aminas aromáticas e amidas simples, dissolvidas em solventes apróticos ou de polaridade moderada. Nesses casos, coeficiente de determinação (R^2) variou entre 0,97 e 1,00, com raiz quadrada do erro-médio (RMSE) $< 0,05$ e o desvio relativo (AARD) moderado ($< 30\%$), confirmando que o modelo é robusto para prever interações dominadas por forças de Van der Waals (Mahmoudabadi; Pazuki, 2020; Bell et al., 2020).

É importante salientar que R^2 , RMSE e AARD avaliam aspectos distintos do desempenho do modelo e, por isso, valores elevados de R^2 não garantem necessariamente baixos erros absolutos ou relativos. O R^2 expressa a correlação entre os valores experimentais e previstos, refletindo a coerência do ajuste, enquanto o RMSE mede o erro médio absoluto e o AARD indica o erro percentual médio em relação aos dados experimentais. Dessa forma, um sistema pode apresentar alta correlação (R^2 próximo de 1) e ainda assim exibir AARD e RMSE elevados, especialmente quando o modelo reproduz corretamente a tendência, mas

superestima ou subestima a magnitude da solubilidade. Esse comportamento é observado na tabela 2, por exemplo, em 1-naftilamina em ciclohexano ($R^2 = 0,967$; AARD = 266%) e curcumina em água ($R^2 = 1,000$; AARD = 92 218%), nos quais o modelo captura a forma geral do comportamento experimental, mas falha na previsão quantitativa.

No caso de solutos contendo grupos carboxílicos apresentaram desempenho significativamente inferior quando dissolvidos em solventes fortemente formadores de ligações de hidrogênio. Nesses sistemas, os desvios estatísticos foram mais pronunciados, com desvio relativo (AARD) frequentemente superiores a 100% e aumento expressivo no erro médio (RMSE), revelando as dificuldades do COSMO-SAC em descrever interações específicas de alta intensidade, como as ligações de hidrogênio (Mahmoudabadi; Pazuki, 2020; Oliveira et al., 2020). Esse comportamento também se reflete nos solventes próticos polares, como água, metanol e etanol; que tendem a exacerbar os desvios para moléculas com múltiplos grupos polares, em contraste com os solventes apróticos polares, acetonitrila, acetona; ou apolares, Ciclohexano, tolueno; nos quais as previsões são mais estáveis (Kang; Lee; Kang, 2020).

TABELA 2 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC ISOLADO.

(Continua)				
Soluto	Solvente	R^2	RMSE	AARD(%)
1-Naftilamina	Acetato de Etila	0,999	0,105	0,160
1-Naftilamina	Acetato de n-Butila	1,000	0,093	0,150
1-Naftilamina	Acetona	0,999	0,157	0,220
1-Naftilamina	Acetonitrila	0,997	0,181	0,270
1-Naftilamina	Ciclohexano	0,967	0,061	2,660
1-Naftilamina	Etanol	0,999	0,037	0,170
1-Naftilamina	Isobutanol	0,933	0,058	0,640
1-Naftilamina	Isopropanol	0,983	0,046	0,780
1-Naftilamina	Metanol	0,999	0,077	0,140
1-Naftilamina	n-Butanol	0,991	0,025	0,170
1-Naftilamina	n-Propanol	0,995	0,009	0,280
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Etila	0,991	0,092	2,950
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Isopropila	0,938	0,086	3,420
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Metila	0,987	0,098	2,980
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de n-Propila	0,769	0,094	3,730
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetona	0,997	0,056	0,600
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetonitrila	0,850	0,069	3,770
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Etanol	0,992	0,040	0,690
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Isobutanol	0,986	0,039	1,270

TABELA 2 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC ISOLADO.

(Continuação)				
Soluto	Solvente	R^2	RMSE	AARD(%)
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Isopropanol	0,767	0,069	1,930
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Metanol	0,997	0,030	0,490
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	n-Pentanol	0,994	0,035	0,810
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	n-Propanol	0,984	0,041	0,880
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	1,4-Dioxano	0,995	0,258	4,580
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetato de Etila	0,159	0,089	5,960
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetona	0,996	0,136	4,950
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetonitrila	0,667	0,107	24,27
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Etanol	0,995	0,132	12,12
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Isopropanol	0,512	0,116	8,890
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Metanol	0,997	0,144	13,23
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	N,N-Dimetilformamida	0,121	0,130	1,450
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	n-Butanol	0,999	0,085	7,250
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	N-Metilpirrolidona	0,992	0,154	1,420
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	n-Propanol	0,123	0,086	7,860
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Tolueno	0,040	0,015	0,900
Ácido Cinâmico	Etanol	0,995	0,169	1,880
Ácido Cinâmico	Etanol + Água	0,871	0,110	14,89
Ácido Cinâmico	Metanol	0,997	0,180	2,270
Ácido Cinâmico	Metanol + Água	0,747	0,107	67,45
Ácido Isoftálico	Etanol + Água	0,656	0,001	0,330
Ácido Isoftálico	Isopropanol + Água	0,708	0,001	0,290
Ácido Isoftálico	Metanol + Água	0,449	0,006	4,390
Ácido Isoftálico	n-Propanol + Água	0,036	0,001	0,640
Ácido Nicotínico	2-Propanol	0,254	0,040	8,040
Ácido Nicotínico	Acetato de Etila	0,983	0,020	12,04
Ácido Nicotínico	Acetona	0,989	0,024	14,16
Ácido Nicotínico	Água	0,966	0,006	0,830
Ácido Nicotínico	Dimetilsulfóxido	0,998	0,078	0,960
Ácido Nicotínico	Dimetilsulfóxido	0,998	0,078	0,960
Ácido Nicotínico	Dimetilsulfóxido (DMSO)	0,998	0,078	0,960
Ácido Nicotínico	Etanol	0,777	0,031	4,390
Ácido Nicotínico	Metanol	0,993	0,034	5,720
Ácido Nicotínico	n-Butanol	0,992	0,022	2,870
Ácido Nicotínico	n-Propanol	0,971	0,021	2,610
Artemisinina	Etanol	0,990	0,017	0,220
Artemisinina	n-Heptano	0,049	0,070	0,770
Artemisinina	Tolueno	0,935	0,017	0,270
Baclofeno	2-Propanol	0,887	0,000	0,640
Baclofeno	Etanol	0,076	0,003	67,84
Baclofeno	Metanol	0,168	0,000	1,670
Baclofeno	n-Propanol	0,917	0,000	0,700
Cafeína	Água	-	-	-
Carbamazepina	Água	0,226	0,010	7,450
Curcumina	Água	1,000	0,005	922,2

TABELA 2 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC ISOLADO.

Solutos	Solvente	R^2	RMSE	(Conclusão)
				AARD(%)
Frutose	Água	0,363	0,017	0,710
Lidocaína	Água	-	-	-
Naproxeno	Água	0,659	0,000	10,12
Naproxeno	Etilenoglicol + Etanol	0,410	0,018	1,490
Nifedipina	Acetato de Etila	0,959	0,007	0,400
Nifedipina	Acetato de Isopropila	0,018	0,018	1,690
Nifedipina	Acetato de n-Butila	0,996	0,002	0,290
Nifedipina	Etanol	0,998	0,002	0,320
Nifedipina	Formiato de Etila	0,999	0,013	0,690
Nifedipina	Formiato de Metila	0,035	0,034	2,540
Nifedipina	Isobutanol	0,788	0,002	0,520
Nifedipina	Isopropanol	0,917	0,001	0,310
Nifedipina	Metanol	0,886	0,010	2,540
Nifedipina	n-Butanol	0,989	0,003	0,680
Nifedipina	n-Propanol	0,362	0,003	0,920
Nifedipina	sec-Butanol	0,997	0,003	0,620
Piroxicam	Água	1,000	0,000	53,07
Progesterona	1-Octanol + Etanol	0,378	0,025	1,730
RDX	Acetonitrila + Água	0,828	0,037	10,02
RDX	Ácido Nítrico + Água	0,807	0,003	4,990
Sacarose	Água	0,051	0,001	7,280
Sulfanilamida	Acetato de Etila	0,166	0,000	40,79
Sulfanilamida	Acetona	0,999	0,025	0,280
Sulfanilamida	Acetona + Acetato de Etila	0,470	0,015	6,000
Sulfanilamida	Acetona + Etanol	0,920	0,019	0,470
Sulfanilamida	Acetona + Metanol	0,908	0,013	0,280
Sulfanilamida	Acetona + Tolueno	0,708	0,006	2,950
Sulfanilamida	Etanol	0,999	0,009	0,710
Sulfanilamida	Metanol	0,998	0,010	0,420
Sulfanilamida	Tolueno	0,954	0,000	10,19
Taurina	Água	0,999	0,013	0,640
Taurina	Água + 1,2-Propanodiol	0,138	0,025	11,96
Taurina	Água + Acetona	0,148	0,030	28,56
Taurina	Água + Acetonitrila	0,001	0,033	11,52
Taurina	Água + Etilenoglicol	0,518	0,019	3,230
ϵ -Caprolactama	Acetato de Etila	0,978	0,164	0,830
ϵ -Caprolactama	Acetonitrila	0,999	0,102	0,400
ϵ -Caprolactama	Benzeno	0,996	0,063	0,210
ϵ -Caprolactama	Ciclohexano	0,924	0,048	1,940

FONTE: O Autor, (2025).

De forma semelhante, efeitos estéricos e de tamanho molecular impactam diretamente na acurácia das previsões, moléculas volumosas, como a curcumina e a progesterona, apresentaram solubilidades menores do que o previsto, em parte

porque o modelo não representa de maneira detalhada como o volume e o formato da molécula afetam seu ajuste na fase líquida, nem as alterações na entropia do sistema associadas ao processo de dissolução (Patsahan; Pizio, 2023; Antolović; Vrabec; Klajmon, 2024).

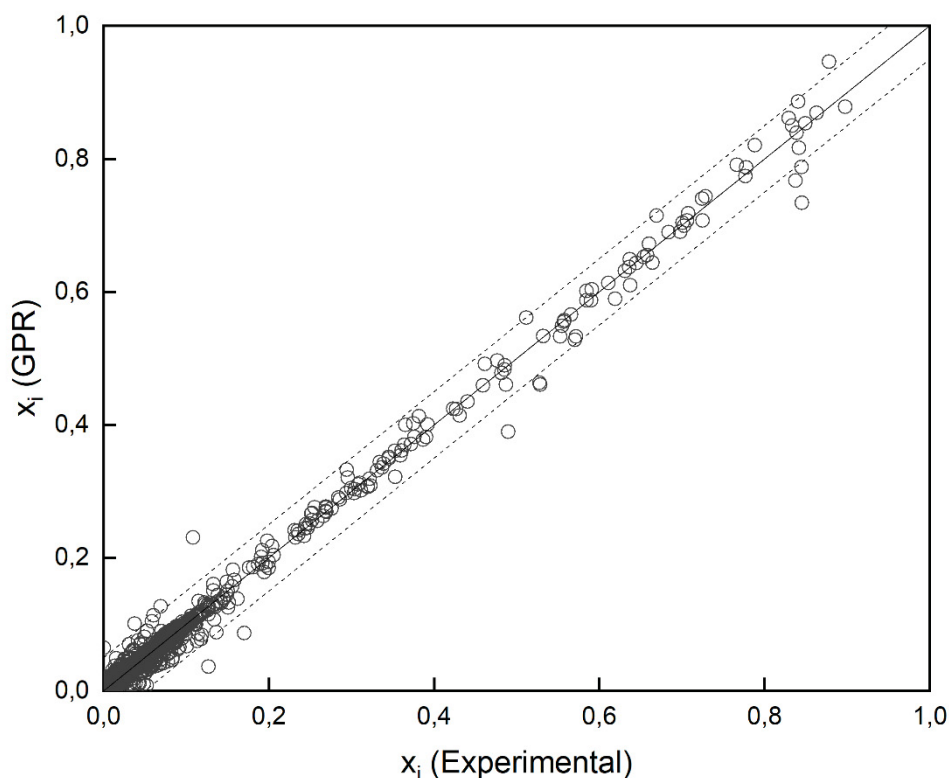
Esses resultados reforçam que, apesar de ser um modelo termodinâmico robusto e baseado em fundamentos físico-químicos sólidos, o COSMO-SAC apresenta limitações para previsão quantitativa em sistemas complexos. Essa conclusão justifica a adoção de abordagens híbridas, como a incorporação de modelos de aprendizado de máquina, capazes de corrigir os desvios sistemáticos e ampliar o alcance preditivo do modelo

4.3 RESULTADOS DO MODELO DE *MACHINE LEARNING* (GPR)

A aplicação da Regressão por Processos Gaussianos (GPR) representou um avanço significativo na qualidade das previsões de solubilidade. O resultado individual para cada sistema está disponível no Apêndice III. A figura 7, de paridade entre os valores experimentais e os previstos pelo modelo ajustado, evidencia o alinhamento muito próximo à linha de identidade e dentro do intervalo de confiança. Esse resultado confirma que o GPR conseguiu não apenas corrigir os desvios sistemáticos observados no COSMO-SAC, mas também reduzir a dispersão das previsões, melhorando a precisão global do modelo.

Os ganhos foram confirmados por métricas quantitativas, como demonstrado na tabela 3. Em termos matemáticos, a integração do COSMO-SAC com o GPR demonstrou capacidade de reduzir significativamente a dispersão dos resultados e suavizar desvios sistemáticos, especialmente ao corrigir a tendência do modelo termodinâmico de superestimar ou subestimar determinadas solubilidades. Essa atenuação é refletida pela expressiva queda nos valores de RMSE e AARD, redução média superior a 60% e de até 70% respectivamente, aliado ao aumento do coeficiente de determinação (R^2) para valores na faixa acima de 0,95, com a implementação do novo modelo.

FIGURA 7 - DISPERSÃO ENTRE VALORES PREVISTOS PELO COSMO-SAC E GPR E VALORES EXPERIMENTAIS DE SOLUBILIDADE.



FONTE: O Autor, (2025).

Estes ganhos foram especialmente expressivos em solventes polares, onde o COSMO-SAC tradicional tende a superestimar a solubilidade de solutos hidrofóbicos, evidenciando que o modelo híbrido conseguiu aprender padrões globais de correção a partir do conjunto de dados disponível. Contudo, mesmo após essa melhora, a exatidão não foi plenamente alcançada em sistemas desafiadores, o que se traduz no fato de que, embora os pontos se aproximem da linha de identidade, como é possível observar na figura 7, permanecem deslocamentos residuais que indicam lacunas na descrição físico-química do fenômeno.

Do ponto de vista químico, os melhores desempenhos foram observados em sistemas envolvendo moléculas apolares ou moderadamente polares, dissolvidas em solventes apróticos. Nessas condições, as interações predominantes são forças de Van der Waals e de London, bem descritas pelo COSMO-SAC e, portanto, facilmente ajustadas pelo GPR.

Outro achado relevante foi o desempenho superior do modelo em misturas binárias de solventes contendo água. Enquanto o COSMO-SAC isolado superestimava a solubilidade para compostos hidrofóbicos, o GPR foi capaz de ajustar

essas previsões de forma coerente com os dados experimentais, demonstrando capacidade de generalização mesmo em sistemas com comportamento altamente não linear.

Em contraste, os desvios acentuados ainda foram observados para moléculas altamente polares ou contendo múltiplos grupos doadores/aceptores de hidrogênio em solventes próticos. Tomando como exemplo, o caso específico, como o da curcumina em água, observou-se uma piora aparente nas métricas ($R^2 = 0,731$; AARD = 144818%) em comparação ao COSMO-SAC isolado ($R^2 = 1,000$; AARD = 92218%). Essa diferença, porém, não reflete uma degradação do modelo híbrido, mas sim a maior sensibilidade do GPR às inconsistências experimentais e à natureza fortemente não linear desse sistema. A curcumina é um soluto altamente hidrofóbico e volumoso, capaz de formar agregados coloidais e interações intermoleculares complexas em meio aquoso, fenômenos que fogem ao escopo dos descritores utilizados ($\log K_{OW}$ e $WALK_{mix}$) e que resultam em variações bruscas na fração molar experimental. Assim, o GPR, ao tentar ajustar localmente esses dados, amplifica a discrepância percentual em sistemas onde a solubilidade é extremamente baixa, o que explica o AARD elevado mesmo com redução absoluta do erro médio (RMSE).

TABELA 3 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC E GPR

(Continua)				
Soluto	Solvente	R^2	RMSE	AARD(%)
1-Naftilamina	Acetato de Etila	0,976	0,018	0,062
1-Naftilamina	Acetona	0,989	0,001	0,013
1-Naftilamina	Acetonitrila	0,998	0,000	0,051
1-Naftilamina	Ciclohexano	0,856	0,003	0,194
1-Naftilamina	Etanol	0,997	0,001	0,044
1-Naftilamina	Isobutanol	0,996	0,007	0,080
1-Naftilamina	Isopropanol	0,983	0,004	0,079
1-Naftilamina	Metanol	0,993	0,006	0,052
1-Naftilamina	n-Butanol	0,993	0,007	0,049
1-Naftilamina	n-Butil Acetato	1,000	0,000	0,005
1-Naftilamina	n-Propanol	0,980	0,011	0,066
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Etila	0,982	0,022	0,628
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Isopropila	0,971	0,009	0,360
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de Metila	0,991	0,028	0,760
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetato de n-Propila	0,997	0,003	0,100
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetona	0,980	0,013	0,173
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Acetonitrila	0,966	0,014	0,581
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Etanol	0,961	0,023	0,293
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Isobutanol	0,832	0,007	0,173

TABELA 3 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC E GPR

(Continuação)				
Soluto	Solvente	R^2	RMSE	AARD(%)
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Isopropanol	0,981	0,013	0,235
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	Metanol	0,972	0,014	0,169
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	n-Pentanol	0,997	0,000	0,064
Ácido 2-Etóxi-1-Naftoico	n-Propanol	0,987	0,014	0,227
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	1,4-Dioxano	0,998	0,001	0,018
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetato de Etila	0,742	0,001	0,106
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetona	0,968	0,002	0,083
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Acetonitrila	0,231	0,005	1,000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Etanol	0,978	0,005	0,409
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Isopropanol	0,900	0,000	0,078
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Metanol	0,967	0,005	0,372
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	N,N-Dimetilformamida	0,979	0,002	0,082
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	n-Butanol	0,997	0,000	0,041
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	N-Metilpirrolidona	0,999	0,003	0,030
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	n-Propanol	0,671	0,000	0,166
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico	Tolueno	0,646	0,001	0,090
Ácido Cinâmico	Etanol	0,976	0,001	0,078
Ácido Cinâmico	Etanol + Água	0,976	0,002	0,367
Ácido Cinâmico	Metanol	0,978	0,001	0,063
Ácido Cinâmico	Metanol + Água	0,981	0,002	1,548
Ácido Isoftálico	Etanol + Água	0,656	0,001	0,330
Ácido Isoftálico	Isopropanol + Água	0,708	0,001	0,292
Ácido Isoftálico	Metanol + Água	0,449	0,006	4,385
Ácido Isoftálico	n-Propanol + Água	0,036	0,001	0,644
Ácido Nicotínico	2-Propanol	0,254	0,040	8,042
Ácido Nicotínico	Acetato de Etila	0,983	0,020	12,04
Ácido Nicotínico	Acetona	0,989	0,024	14,16
Ácido Nicotínico	Água	0,966	0,006	0,835
Ácido Nicotínico	Dimetil Sulfóxido	0,998	0,078	0,957
Ácido Nicotínico	Etanol	0,777	0,031	4,386
Ácido Nicotínico	Metanol	0,993	0,034	5,718
Ácido Nicotínico	n-Butanol	0,992	0,022	2,867
Ácido Nicotínico	n-Propanol	0,971	0,021	2,606
Artemisinina	Etanol	0,349	0,024	0,397
Artemisinina	n-Heptano	0,448	0,011	0,259
Artemisinina	Tolueno	0,967	0,001	0,075
Baclofeno	2-Propanol	0,358	0,004	56,30
Baclofeno	Etanol	0,008	0,004	98,06
Baclofeno	Metanol	0,916	0,001	8,032
Baclofeno	n-Propanol	0,508	0,004	54,53
Cafeína	Água	0,000	0,000	0,000
Carbamazepina	Água	0,461	0,000	4,805
Curcumina	Água	0,731	0,000	1448
Frutose	Água	0,363	0,017	0,706

TABELA 3 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O COSMO-SAC E GPR

Soluto	Solvente	R^2	RMSE	(Conclusão)
				AARD(%)
Lidocaína	Água	0,000	0,000	0,000
Naproxeno	Água	0,659	0,000	10,12
Naproxeno	Etileno Glicol + Etanol	0,410	0,018	1,491
Nifedipina	Acetato de Etila	0,959	0,007	0,396
Nifedipina	Acetato de Isopropila	0,018	0,018	1,692
Nifedipina	Acetato de n-Butila	0,996	0,002	0,294
Nifedipina	Etanol	0,998	0,002	0,320
Nifedipina	Formiato de Etila	0,999	0,013	0,690
Nifedipina	Formiato de Metila	0,035	0,034	2,544
Nifedipina	Isobutanol	0,788	0,002	0,522
Nifedipina	Isopropanol	0,917	0,001	0,314
Nifedipina	Metanol	0,886	0,010	2,543
Nifedipina	n-Butanol	0,989	0,003	0,679
Nifedipina	n-Propanol	0,362	0,003	0,916
Nifedipina	sec-Butanol	0,997	0,003	0,616
Piroxicam	Água	1,000	0,000	53,07
Progesterona	1-Octanol; Etanol	0,378	0,025	1,726
RDX	Acetonitrila; Água	0,828	0,037	10,02
RDX	Ácido Nítrico; Água	0,807	0,003	4,987
Sacarose	Água	0,051	0,001	7,282
Sulfanilamida	Acetato de Etila	0,166	0,000	40,80
Sulfanilamida	Acetona	0,999	0,025	0,278
Sulfanilamida	Acetona; Acetato de Etila	0,470	0,015	5,998
Sulfanilamida	Acetona; Etanol	0,920	0,019	0,471
Sulfanilamida	Acetona; Metanol	0,908	0,013	0,285
Sulfanilamida	Acetona; Tolueno	0,708	0,006	2,948
Sulfanilamida	Etanol	0,999	0,009	0,707
Sulfanilamida	Metanol	0,998	0,010	0,424
Sulfanilamida	Tolueno	0,954	0,000	10,19
Taurina	Água	0,999	0,013	0,636
Taurina	Água; 1,2-Propilenoglicol	0,138	0,025	11,96
Taurina	Água; Acetona	0,148	0,030	28,57
Taurina	Água; Acetonitrila	0,001	0,033	11,52
Taurina	Água; Etilenoglicol	0,518	0,019	3,229
ϵ -Caprolactama	Acetato de Etila	0,978	0,164	0,825
ϵ -Caprolactama	Acetonitrila	0,999	0,102	0,399
ϵ -Caprolactama	Benzeno	0,996	0,063	0,208
ϵ -Caprolactama	Cicloexano	0,924	0,048	1,939

FONTE: O autor, (2025).

Em síntese, o GPR atuou como uma ferramenta de correção estatística robusta, porém ainda limitada pelas informações químicas contidas nos descritores

utilizados. Efeitos altamente não lineares, dependentes da geometria molecular e da densidade das ligações de hidrogênio, dificilmente são capturados de forma completa por descritores médios, como o $\log K_{OW}$ e $WALK_{mix}$. Por essa razão, embora o GPR reduza significativamente os desvios, ele não é capaz de eliminá-los totalmente, evidenciando a necessidade de variáveis mais representativas das interações específicas envolvidas na solvatação.

Portanto a tabela 3, em conjunto, figura 7 de paridade, demonstra de forma clara o impacto positivo da integração entre o COSMO-SAC e o GPR. As métricas estatísticas, R^2 , RMSE e AARD confirmam que o modelo híbrido conseguiu reduzir os desvios sistemáticos e aumentar a consistência das previsões em diferentes sistemas soluto-solvente. Esses resultados reforçam o potencial da abordagem proposta como uma ferramenta robusta para previsão de solubilidade, em consonância com os avanços recentes reportados na literatura sobre a aplicação de modelos híbridos que combinam fundamentos termodinâmicos e técnicas de aprendizado de máquina.

4.3.1 Análise de sensibilidade do modelo GPR

Os hiperparâmetros do GPR, compostos pela variância do sinal (σ_f^2), variância do ruído (σ_n^2) e os comprimentos de correlação (ℓ) de cada variável de entrada, foram definidos a partir de um processo de otimização baseado em *Particle Swarm Optimization* (PSO) combinado com validação cruzada *k-fold* ($k=5$). Essa estratégia buscou minimizar o erro quadrático médio das previsões, garantindo maior capacidade de generalização do modelo. Como resultado, obtiveram-se valores de *length scale* coerentes com a relevância das variáveis, maior para x_{cosmo} , além de uma variância de ruído reduzida, indicando bom ajuste aos dados sem sobreajuste como possível observar na tabela 4.

A partir dos resultados, tabela 4, observa-se que a variância do sinal (σ_f^2) é elevada, refletindo a ampla variabilidade capturada pelo modelo e indicando que o GPR é capaz de representar adequadamente a amplitude das flutuações de solubilidade observadas. A variância do ruído (σ_n^2) foi baixa, sugerindo que o ajuste é consistente com os dados experimentais e que não houve sobreajuste significativo, o *overfitting*. Entre os comprimentos de correlação (ℓ), confirma-se o papel central da predição inicial do COSMO-SAC na correção realizada pelo modelo híbrido.

TABELA 4 - HIPERPARÂMETROS DO MODELO GPR E VALORES AJUSTADOS

Hiperparâmetro	Valor Ajustado
σ_f^2	243 ²
σ_n^2	81,8
ℓ_T	11,6
$\ell_{Log Kow,soluto}$	0,133
ℓ_{x1}	43,7
ℓ_{x2}	98
ℓ_{WALK}	0,0396
ℓ_{xCOSMO}	0,507

FONTE: O Autor, (2025).

Além disso, valores muito pequenos, associados ao logaritmo do coeficiente de partição n-octanol/água para o soluto e solvente, indicam alta sensibilidade às variáveis relacionadas à polaridade da mistura e ao caráter hidrofóbico do soluto, respectivamente, reforçando sua importância na modulação da solubilidade.

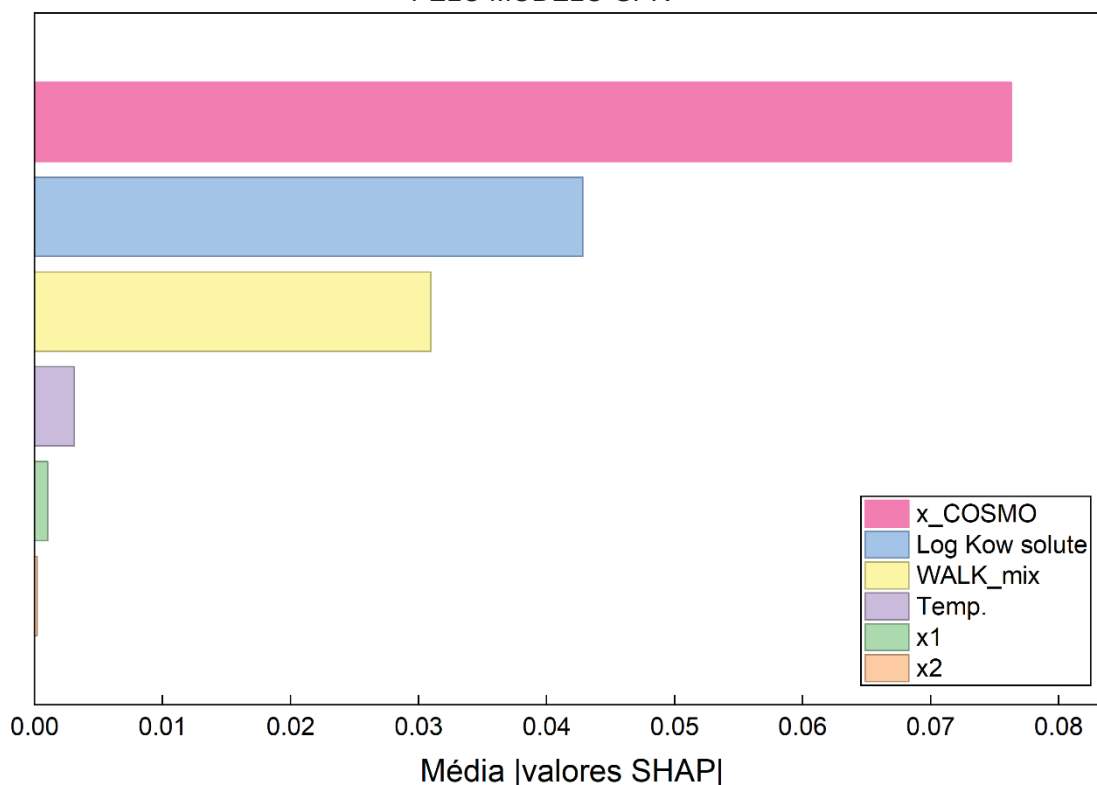
Por outro lado, os comprimentos de correlação mais longos, que correspondem a fração molar do solvente, x_1 e x_2 , mostram que variações de composição são incorporadas de maneira mais suave, exercendo efeito menos acentuado sobre as previsões. Esse conjunto de resultados sugere que o GPR é fortemente guiado pelas informações físico-químicas do COSMO-SAC e pelas propriedades de polaridade.

4.4 ANÁLISE DE INTERPRETABILIDADE (SHAP)

A interpretabilidade do modelo de *Machine Learning* foi avaliada utilizando os valores de SHAP (*SHapley Additive exPlanations*), uma das abordagens mais robustas para quantificar a contribuição de cada variável de entrada na previsão final.

A figura 8 corresponde a importância média das variáveis, no qual se observa que a variável x_{cosmo} , referente a solubilidade prevista pelo COSMO-SAC, foi de longe a mais relevante para o modelo, com contribuição média aproximadamente o dobro da segunda variável mais importante. Na sequência, $WALK_{mix}$, coeficiente de partição médio da mistura, e $\log K_{OW,soluto}$, o coeficiente de partição octanol-água do soluto, aparecem como variáveis secundárias, desempenhando papel importante na modulação das previsões. Já temperatura e as frações molares x_1 e x_2 mostraram impacto próximo de zero, indicando baixa relevância no ajuste.

FIGURA 8 - CONTRIBUIÇÃO MÉDIA DE CADA VARIÁVEL NA PREVISÃO DE SOLUBILIDADE PELO MODELO GPR

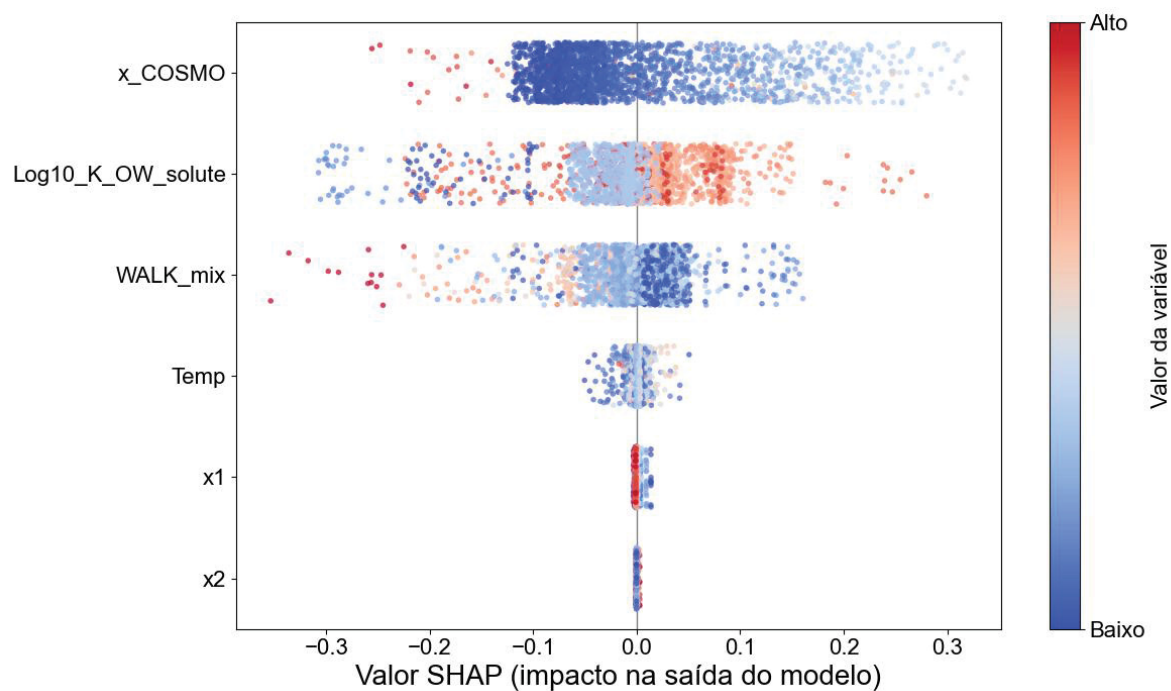


FONTE: O Autor, (2025).

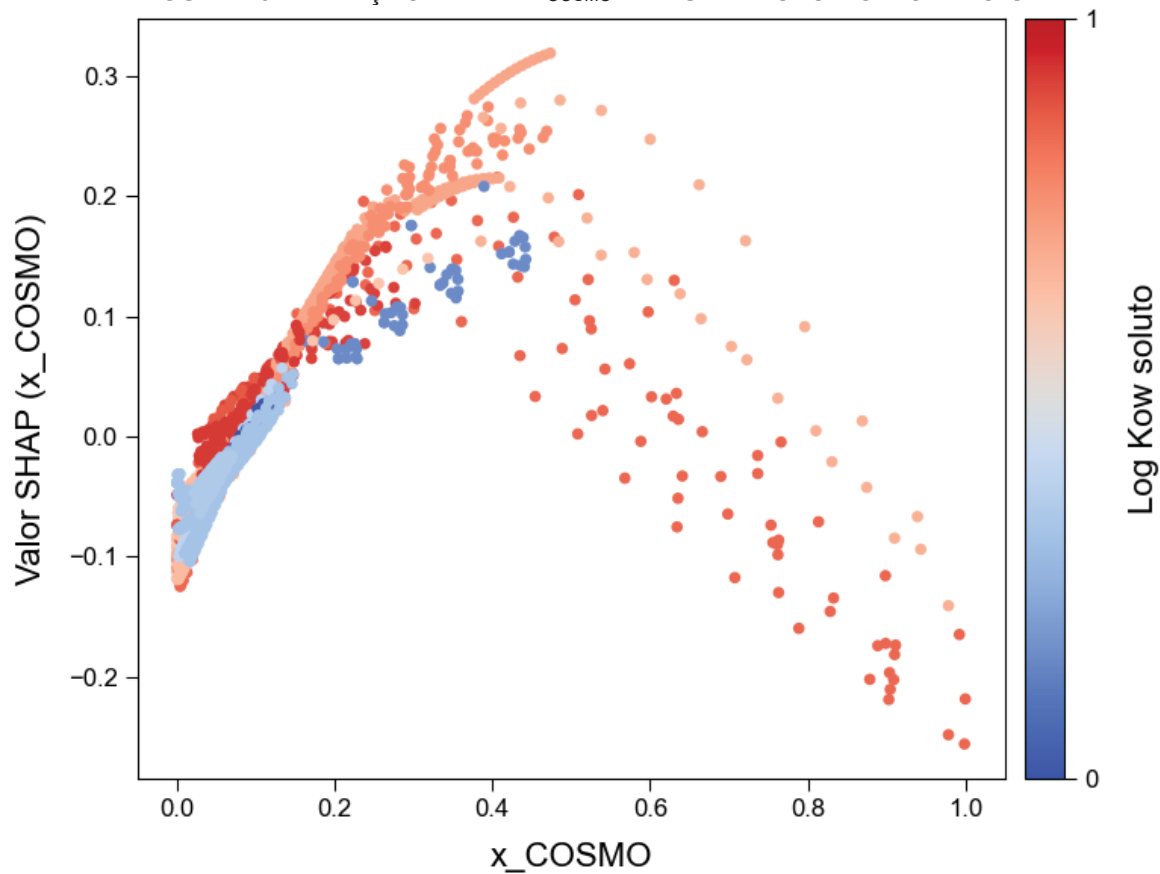
A partir dos valores médios de importância SHAP, observa-se que x_{cosmo} foi responsável por cerca de 0,08 da contribuição média total, seguida por $\log K_{OW,\text{solute}}$ (0,04) e $WALK_{\text{mix}}$ (0,03). As variáveis T , x_1 e x_2 , correspondendo a temperatura do sistema e as frações molares dos solventes, apresentaram valores $<0,01$, indicando influência marginal sobre as previsões.

A figura 9 exibe o gráfico de resumo dos valores SHAP, permitindo visualizar o efeito de cada variável individualmente sobre a saída do modelo. Nota-se que valores elevados de x_{cosmo} (em vermelho) estão associados a contribuições positivas, ou seja, o GPR tende a aumentar a solubilidade prevista quando a estimativa inicial do COSMO-SAC é alta. Um comportamento semelhante, embora menos pronunciado, foi observado para $\log K_{OW,\text{solute}}$, sugerindo que solutos mais hidrofóbicos tendem a ter previsões de solubilidade ajustadas para cima. Em contraste, $WALK_{\text{mix}}$ apresenta comportamento misto, com pontos distribuídos em torno de valores positivos e negativos, o que indica que seu efeito depende do sistema específico, no caso o tipo de solvente e soluto.

FIGURA 9 - EFEITO DAS VARIÁVEIS DE ENTRADA NA CORREÇÃO DE SOLUBILIDADE VIA GPR



FONTE: O Autor, (2025).

FIGURA 10 - RELAÇÃO ENTRE x_{COSMO} E SEU IMPACTO NO MODELO GPR

FONTE: O Autor, (2025).

Paralelamente, a figura 10 mostra o gráfico de dependência de x_{cosmo} , evidenciando o caráter não linear da relação entre esta variável e o ajuste realizado pelo GPR. Para valores baixos de x_{cosmo} , o modelo corrige pouco a previsão, mas à medida que x_{cosmo} aumenta, a contribuição do GPR cresce de forma positiva até atingir um máximo na região intermediária ($x_{cosmo} \approx 0,4 - 0,6$). A partir desse ponto, o efeito tende a diminuir, sugerindo que o modelo atua como um “regulador” para evitar superestimativas de solubilidade em sistemas onde o COSMO-SAC prevê valores excessivamente altos. A coloração dos pontos demonstra ainda que solutos com $\log K_{ow}$ elevado (hidrofóbicos) são os que mais contribuem para os ajustes positivos, coerente com a expectativa de que estes sistemas são mais sensíveis ao balanço de interações hidrofóbicas.

Em conjunto, esses resultados indicam que o GPR atua de forma a corrigir sistematicamente os desvios do COSMO-SAC, preservando as tendências gerais previstas pelo modelo termodinâmico, mas refinando as estimativas para obter maior aderência aos dados experimentais. Esse resultado evidencia que o GPR atua de forma seletiva, concentrando-se nas variáveis que efetivamente explicam os desvios entre COSMO-SAC e experimento, evitando sobreajuste e garantindo maior robustez ao modelo.

4.5 COMPARAÇÃO DE DESEMPENHO ENTRE PREDIÇÃO VIA COSMO-SAC E COSMO-SAC + GPR

A comparação entre o modelo termodinâmico COSMO-SAC isolado e a abordagem híbrida COSMO-SAC+GPR evidencia ganhos significativos de desempenho, confirmando o potencial do uso de técnicas de aprendizado de máquina para correção sistemática de desvios residuais. Conforme discutido na seção 4.2, o COSMO-SAC foi capaz de reproduzir adequadamente as tendências gerais de solubilidade, apresentando coeficientes de determinação (R^2) elevados, tipicamente acima de 0,90, para sistemas simples e apolares, mas com maiores desvios em sistemas fortemente associativos ou com elevado caráter polar, especialmente na presença de solventes próticos como água e álcoois.

A aplicação do GPR resultou em uma melhora expressiva nos indicadores estatísticos. Em média, o R^2 aumentou em relação ao COSMO-SAC puro, atingindo valores próximos de 1,0 para a maior parte dos sistemas avaliados, inclusive para

aqueles que inicialmente apresentavam ajustes mais modestos. O erro quadrático médio (RMSE) foi reduzido de forma consistente, chegando a valores próximos de zero em solventes como acetato de etila, acetonitrila e água. De forma semelhante, o desvio absoluto relativo médio (AARD) apresentou quedas significativas, reduzindo de dezenas ou centenas de pontos percentuais para valores inferiores a 10% em vários casos críticos.

A figura 7 de paridade entre os valores experimentais e as previsões obtidas com o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR. Observa-se uma distribuição mais estreita em torno da linha de identidade ($y = x$) em comparação à figura 6 COSMO-SAC isolado, indicando menor dispersão e maior acurácia do modelo. Considerando o conjunto de dados de forma global, sem distinção entre pares específicos de soluto-solvente, observa-se uma melhora expressiva no desempenho preditivo. O coeficiente de determinação (R^2) aumentou de 0,75 para 0,99 ao comparar o modelo COSMO-SAC isolado com a abordagem híbrida COSMO-SAC+GPR. Além disso, houve uma redução de 99,6% no erro quadrático médio (RMSE) e de 35,2% no desvio absoluto relativo médio (AARD), reforçando o ganho de precisão e robustez do modelo híbrido.

Em termos de interpretação físico-química, o GPR mostrou-se eficiente em corrigir parcialmente as limitações conhecidas do COSMO-SAC, especialmente na modelagem de interações de hidrogênio e efeitos estéricos não explicitamente considerados pelo modelo termodinâmico. Esta correção foi seletiva, preservando o bom desempenho do COSMO-SAC em sistemas dominados por interações de Van der Waals, mas ajustando previsões em sistemas com fortes efeitos de solvatação, o que se reflete na expressiva melhora das métricas globais.

Esses resultados são consistentes com estudos recentes que combinam modelos preditivos termodinâmicos com *machine learning* para capturar não linearidades residuais e melhorar o poder preditivo (Fu *et al.*, 2025) (Mu *et al.*, 2024) (Tian *et al.*, 2024) (Mac Fhionnlaoich *et al.*, 2024). Assim, a abordagem COSMO-SAC+GPR apresenta-se como uma alternativa robusta e confiável para a predição de solubilidade em sistemas multicomponentes, especialmente em casos em que o modelo termodinâmico isolado apresenta desempenho limitado.

4.6 TESTE DE VALIDAÇÃO DO MODELO HÍBRIDO COSMO-SAC+GPR

Com o objetivo de avaliar a capacidade de generalização do modelo híbrido COSMO-SAC+GPR, realizou-se um teste de validação utilizando sistemas soluto-solvente que não fizeram parte do conjunto de treinamento. Foram escolhidos dois compostos de interesse, a cafeína, um bioativo amplamente estudado e estruturalmente semelhante a várias moléculas presentes na base de dados, e ácido benzoico, um composto aromático de caráter ácido, frequentemente utilizado como modelo em estudos de solubilidade e termodinâmica por apresentar interações específicas, como ligações de hidrogênio, que não está descrito na base de dados e consequentemente não avaliado previamente pelo modelo COSMO-SAC+GPR. Ambos foram avaliados em diferentes misturas de solventes, cobrindo uma ampla faixa de polaridades, a fim de investigar o desempenho do modelo em condições químicas diversas.

Conforme, os gráficos (A e B) na figura 11, os resultados do teste de validação para o sistema cafeína mostraram que o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR foi capaz de corrigir de forma significativa os desvios do COSMO-SAC, especialmente para o sistema Cafeína-Metanol/Tetracloreto de carbono, no qual o R^2 aumentou de 0,055 para 0,420. Nos sistemas contendo N-metilpirrolidona e 1,2-propilenoglicol, observou-se uma redução do R^2 em relação ao modelo termodinâmico isolado, embora tenha havido redução expressiva no RMSE e no AARD. Os resultados indicam que o modelo híbrido foi eficiente para aproximar os valores previstos dos experimentais, ainda que a relação linear entre eles tenha se tornado menos expressiva em alguns casos.

TABELA 5 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O SISTEMA CAFEÍNA

Soluto	Solvente	T (K)	R ²		RMSE		AARD(%)	
			COSMO	GPR	COSMO	GPR	COSMO	GPR
Cafeína	Metanol; Tetracloreto de carbono	298,15	0,055	0,420	0,015	0,004	3,06	0,88
Cafeína	N-Metilpirrolidona; 1,2-Propileno Glicol	293,20	0,992	0,539	0,013	0,004	3,88	2,06
Cafeína	N-Metilpirrolidona; 1,2-Propileno Glicol	298,20	0,998	0,570	0,014	0,003	2,08	0,74
Cafeína	N-Metilpirrolidona; 1,2-Propileno Glicol	303,20	0,989	0,565	0,015	0,001	1,53	0,39
Cafeína	N-Metilpirrolidona; 1,2-Propileno Glicol	308,20	0,963	0,494	0,016	0,000	1,25	0,23
Cafeína	N-Metilpirrolidona; 1,2-Propileno Glicol	313,20	0,953	0,533	0,018	0,000	1,29	0,21

FONTE: O Autor, (2025).

Como evidenciado pela análise de interpretabilidade SHAP, seção 4.4, a temperatura exerce influência marginal sobre as previsões do modelo. No entanto, ao avaliar o sistema cafeína–N-metilpirrolidona;1,2-propilenoglicol na faixa de 293,2 a 313,2 K, observou-se o esperado aumento da solubilidade com a elevação da temperatura, uma vez que o processo de dissolução é, em geral, endotérmico para a maioria dos solutos orgânicos. Nesse cenário, as previsões do modelo híbrido apresentaram melhora significativa, refletida pela redução expressiva de RMSE e AARD.

Esse resultado sugere que o COSMO-SAC+GPR é mais eficiente na correção dos desvios em regiões de maior solubilidade, como destacado na análise SHAP, possivelmente porque, nessas condições, as incertezas relativas são menores e o modelo consegue capturar com maior precisão as relações entre as variáveis de entrada, atuando na correção do dado previsto.

Por outro lado, em sistemas com baixas solubilidades, pequenas diferenças absolutas podem gerar grandes desvios relativos, tornando o ajuste mais sensível às limitações do modelo. Assim, a melhora observada pode ser atribuída à maior robustez estatística em regiões de solubilidade elevada, onde o GPR é capaz de “aprender” padrões mais consistentes e atenuar a superestimação ou subestimação do COSMO-SAC.

TABELA 6 - MÉTRICAS ESTATÍSTICAS (R^2 , RMSE E AARD) OBTIDAS PARA O SISTEMA ÁCIDO BENZOICO

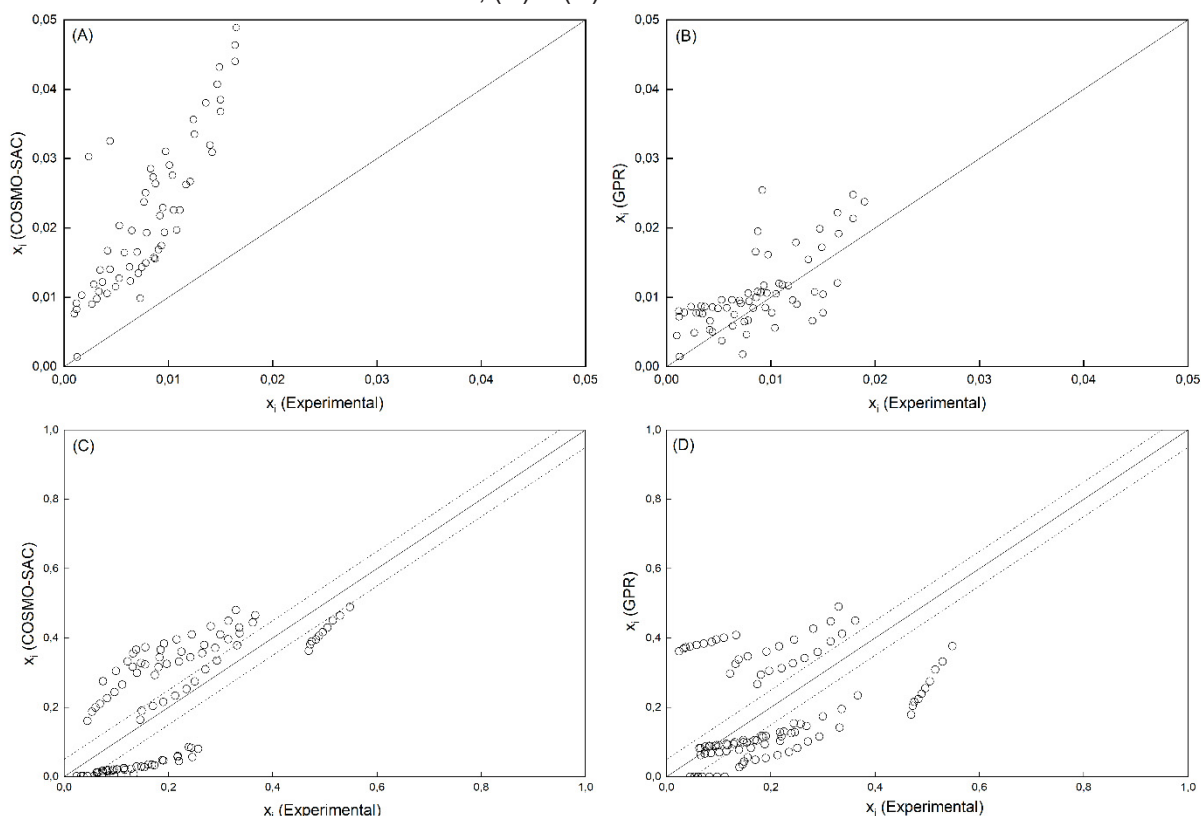
Solute	Solvente	R ²		RMSE		AARD(%)	
		COSMO	GPR	COSMO	GPR	COSMO	GPR
Ác. Benzoico	1,2-Etanditiol	0,995	0,743	0,148	0,080	1,73	0,88
Ác. Benzoico	n-Octano	0,957	0,984	0,066	0,314	0,95	6,22
Ác. Benzoico	Dietilenoglicol	0,980	0,950	0,148	0,076	1,02	0,30
Ác. Benzoico	n,n-Dimetilacetamida	0,982	0,989	0,079	0,237	0,16	0,48
Ác. Benzoico	p-Xileno	0,902	0,905	0,105	0,035	0,77	0,27
Ác. Benzoico	m-xileno	0,888	0,891	0,121	0,049	0,80	0,30
Ác. Benzoico	o-xileno	0,915	0,921	0,103	0,057	0,76	0,35
Ác. Benzoico	Ácido Propiônico	0,981	0,965	0,031	0,149	0,14	0,68
Ác. Benzoico	Cicloexanona	0,971	0,969	0,101	0,088	0,44	0,37
Ác. Benzoico	Sulfolano	0,962	0,960	0,185	0,168	1,04	0,92

FONTE: O Autor, (2025).

Nos sistemas contendo ácido benzoico, o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR apresentou melhora modesta em relação ao COSMO-SAC isolado. Como ilustrado na

figura 11 de paridade (C e D), observa-se um ajuste ligeiramente melhor em direção à linha de identidade, com redução de RMSE e AARD em solventes como p-xileno, m-xileno, o-xileno, dietilenoglicol, evidenciando que o GPR foi capaz de corrigir parcialmente os desvios sistemáticos. No entanto, em alguns solventes, como n-octano e n,n-dimetilacetamida, a aplicação do modelo híbrido resultou em um leve aumento da dispersão, refletindo a dificuldade do algoritmo em generalizar para sistemas com perfis de polaridade ou interações específicas pouco representadas na base de treinamento.

FIGURA 11 - GRÁFICOS DE PARIDADE PARA OS SISTEMAS DE VALIDAÇÃO: (A) E (B) CAFEÍNA, (C) E (D) ÁCIDO BENZOICO



FONTE: O Autor, (2025).

Observa-se que a ausência de um padrão entre os resultados se deve às diferenças nas interações específicas do ácido benzoico com cada solvente, variando entre forças π - π , hidrofóbicas e de hidrogênio, o que torna o desempenho do modelo dependente da similaridade química com os sistemas presentes na base de treinamento.

Nessa perspectiva, o resultado sugere que, embora o modelo híbrido melhore a descrição de misturas envolvendo solventes aromáticos ou polares moderados, ele

ainda encontra limitações para prever solubilidade em sistemas de alta polaridade ou com características de solvatação muito distintas daquelas incluídas na calibração. Essa diferença de desempenho em relação à cafeína pode ser atribuída à maior representatividade de sistemas análogos à cafeína na base de dados, o que proporciona ao GPR um aprendizado mais robusto e capacidade superior de ajuste para este composto.

A comparação entre os resultados de validação para cafeína e ácido benzoico evidencia que o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR apresentou melhor desempenho para a cafeína. Portanto, a base de treinamento, composta majoritariamente por sistemas de compostos neutros e moderadamente polares, favoreceu a generalização do modelo para sistemas similares, como a cafeína, enquanto para o ácido benzoico, que possui maior propensão a interações específicas, a correção via GPR foi menos eficiente, refletindo a necessidade de incluir sistemas com propriedades mais complexas na base de dados para ampliar a capacidade preditiva.

Por outro lado, os testes de validação realizados com cafeína e ácido benzoico evidenciaram que o modelo híbrido COSMO-SAC+GPR possui potencial para corrigir os desvios do COSMO-SAC. Assim, conclui-se que o COSMO-SAC+GPR é uma ferramenta promissora para previsão de solubilidade.

5 CONCLUSÃO

O presente trabalho desenvolveu um modelo híbrido para previsão da solubilidade solutos em solventes, integrando o modelo termodinâmico COSMO-SAC à Regressão por Processos Gaussianos (GPR). Essa combinação visou superar limitações do COSMO-SAC em sistemas complexos, introduzindo um ajuste estatístico não paramétrico capaz de reduzir desvios e ampliar a aplicabilidade preditiva.

Os ganhos quantitativos foram expressivos: o coeficiente de determinação médio (R^2) aumentou de 0,75 para 0,99, enquanto os erros RMSE e AARD apresentaram reduções superiores a 90% e 60%, respectivamente. Os gráficos de paridade confirmaram a correção das tendências de superestimação e subestimação observadas no modelo original. A validação com sistemas não incluídos no treinamento, como cafeína e ácido benzoico, demonstrou boa capacidade de generalização, ressaltando a importância da diversidade e qualidade da base experimental.

Entre as contribuições práticas, destaca-se o desenvolvimento de um código em Python modular e reprodutível, aliado à organização de uma base de dados validada e abrangente. Tais recursos constituem ferramentas valiosas para o aprimoramento de modelos e para a seleção racional de solventes, alinhando-se aos princípios da química verde ao reduzir o uso de solventes tóxicos e a necessidade de experimentação extensiva.

Por fim, reconhece-se que o desempenho do modelo depende da qualidade dos dados experimentais e da acurácia inicial do COSMO-SAC. A expansão do banco de dados, incluindo compostos de diferentes classes químicas e sistemas multicomponentes, além da aplicação em solventes eutéticos profundos, líquidos iônicos e sistemas poliméricos, representa uma perspectiva promissora para consolidar o modelo híbrido como ferramenta robusta e sustentável para a indústria química, farmacêutica e de alimentos.

REFERÊNCIAS

- AHMED, Md. T.; AHMED, M. W.; KAMRUZZAMAN, M. A systematic review of explainable artificial intelligence for spectroscopic agricultural quality assessment. **Computers and Electronics in Agriculture**, [s. l.], vol. 235, p. 110354, ago. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2025.110354>.
- AL MOMANI, D. E.; AL ANSARI, Z.; OUDA, M.; ABUJAYYAB, M.; KAREEM, M.; AGBAJE, T.; SIZIRICI, B. Occurrence, treatment, and potential recovery of rare earth elements from wastewater in the context of a circular economy. **Journal of Water Process Engineering**, [s. l.], vol. 55, p. 104223, out. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.104223>.
- ANASTAS, P. T.; WARNER, J. C. **Green Chemistry**. [S. l.]: Oxford University PressOxford, 2000. <https://doi.org/10.1093/oso/9780198506980.001.0001>.
- ANTOLOVIĆ, I.; VRABEC, J.; KLAJMON, M. COSMOPharm: Drug–Polymer Compatibility of Pharmaceutical Amorphous Solid Dispersions from COSMO-SAC. **Molecular Pharmaceutics**, [s. l.], vol. 21, nº 9, p. 4395–4415, 2 set. 2024. <https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.4c00342>.
- ATASOY, M.; OWUSU-AGYEMAN, I.; PLAZA, E.; CETECIOGLU, Z. Bio-based volatile fatty acid production and recovery from waste streams: Current status and future challenges. **Bioresource Technology**, [s. l.], vol. 268, p. 773–786, nov. 2018. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.07.042>.
- BAGLARY, G. R.; KALITA, S.; ISLARY, A.; KUMAR, S. Sustainable extraction of bioactive compounds from aromatic plants and agro-food wastes for food preservation: A review. **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology**, [s. l.], vol. 61, p. 103399, out. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.bcab.2024.103399>.
- BELL, I. H.; MICKOLEIT, E.; HSIEH, C.-M.; LIN, S.-T.; VRABEC, J.; BREITKOPF, C.; JÄGER, A. A Benchmark Open-Source Implementation of COSMO-SAC. **Journal of Chemical Theory and Computation**, [s. l.], vol. 16, nº 4, p. 2635–2646, 14 abr. 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b01016>.
- BOPPEN, K.; MEKALA, M.; MALLARAPU, L. P.; MOHAMMED, R. W.; UTTARAVALLI, A. N.; GIDLA, B. R.; ADDANKI, V. K. Extraction of rain water tree seed oil: Sustainable applications and management. **Bioresource Technology Reports**, [s. l.], vol. 24, p. 101657, dez. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2023.101657>.
- BROWN S. Machine learning explained. 21 abr. 2021. Disponível em: <https://mitsloan.mit.edu/ideas-made-to-matter/machine-learning-explained>. Acessado em: 7 set. 2025.
- CAMARGO, M. C. R. **SOLUBILIDADE DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS EM DIFERENTES SOLVENTES COM MODELOS PREDITIVOS**. 2022. 23–39 f. UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL, Porto Alegre, 2022.
- CAPELLO, C.; FISCHER, U.; HUNGERBÜHLER, K. What is a green solvent? A comprehensive framework for the environmental assessment of solvents. **Green Chemistry**, [s. l.], vol. 9, nº 9, p. 927, 2007. <https://doi.org/10.1039/b617536h>.
- CASTRO-PUYANA, M.; MARINA, M. L.; PLAZA, M. Water as green extraction solvent: Principles and reasons for its use. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, [s. l.], vol. 5, p. 31–36, jun. 2017. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2017.03.009>.
- CAVALCANTE, W. de A.; LEITÃO, R. C.; GEHRING, T. A.; ANGENENT, L. T.; SANTAELLA, S. T. Anaerobic fermentation for n-caproic acid production: A review. **Process Biochemistry**, [s. l.], vol. 54, p. 106–119, mar. 2017. <https://doi.org/10.1016/j.procbio.2016.12.024>.
- CHANG, C.-K.; CHEN, W.-L.; WU, D. T.; LIN, S.-T. Improved Directional Hydrogen Bonding Interactions for the Prediction of Activity Coefficients with COSMO-SAC. **Industrial & Engineering**

Chemistry Research, [s. l.], vol. 57, nº 32, p. 11229–11238, 15 ago. 2018.
<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b02493>.

CHEMAT, F.; VIAN, M. A.; CRAVOTTO, G. Green Extraction of Natural Products: Concept and Principles. **International Journal of Molecular Sciences**, [s. l.], vol. 13, nº 7, p. 8615–8627, 11 jul. 2012. <https://doi.org/10.3390/ijms13078615>.

CLARK, J. H.; TAVENER, S. J. Alternative Solvents: Shades of Green. **Organic Process Research & Development**, [s. l.], vol. 11, nº 1, p. 149–155, 1 jan. 2007. <https://doi.org/10.1021/op060160g>.

CLAUX, O.; SANTERRE, C.; ABERT-VIAN, M.; TOUBOUL, D.; VALLET, N.; CHEMAT, F. Alternative and sustainable solvents for green analytical chemistry. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, [s. l.], vol. 31, p. 100510, out. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2021.100510>.

DAI, Y.; VAN SPRONSEN, J.; WITKAMP, G.-J.; VERPOORTE, R.; CHOI, Y. H. Natural deep eutectic solvents as new potential media for green technology. **Analytica Chimica Acta**, [s. l.], vol. 766, p. 61–68, mar. 2013. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.12.019>.

ELSEVIER. ScienceDirect. [s. d.]. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/>. Acessado em: 4 nov. 2024.

FERRARINI, F.; FLÔRES, G. B.; MUNIZ, A. R.; DE SOARES, R. P. An open and extensible sigma-profile database for COSMO-based models. **AIChE Journal**, [s. l.], vol. 64, nº 9, p. 3443–3455, 31 set. 2018. <https://doi.org/10.1002/aic.16194>.

FU, Y.; MU, W.; BAI, X.; ZHANG, X.; DAI, C.; CHEN, B.; YU, G. Prediction of the solubility of fluorinated gases in ionic liquids by machine learning with COSMO-RS-based descriptors. **Separation and Purification Technology**, [s. l.], vol. 364, 30 ago. 2025.
<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2025.132413>.

GALUSZKA, A.; MIGASZEWSKI, Z.; NAMIEŚNIK, J. The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, [s. l.], vol. 50, p. 78–84, out. 2013. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2013.04.010>. Acessado em: 8 fev. 2025.

GALVÃO, A. C.; ZANGALLI, M. R.; ARCE, P. F.; ROBAZZA, W. S. Solubility of fructose and sucrose in mixtures of methanol and water: Experiment and application of equations of state and activity coefficient model. **Journal of Food Engineering**, [s. l.], vol. 369, p. 111934, maio 2024.
<https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2023.111934>.

GAO, J.; WANG, S.; ERDOGDU, F.; MARRA, F.; SARGHINI, F.; CHEN, L. Machine learning-driven innovations in food processing: A systematic review of applications, challenges, and future developments. **Trends in Food Science and Technology**, [s. l.], vol. 164, 1 out. 2025.
<https://doi.org/10.1016/j.tifs.2025.105204>.

GERBER, R. P.; SOARES, R. P. Assessing the reliability of predictive activity coefficient models for molecules consisting of several functional groups. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, [s. l.], vol. 30, nº 1, p. 1–11, mar. 2013. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322013000100002>.

GERBER, Renan P.; SOARES, R. de P. Prediction of Infinite-Dilution Activity Coefficients Using UNIFAC and COSMO-SAC Variants. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], vol. 49, nº 16, p. 7488–7496, 18 ago. 2010a. <https://doi.org/10.1021/ie901947m>.

GERBER, Renan P.; SOARES, R. de P. Prediction of Infinite-Dilution Activity Coefficients Using UNIFAC and COSMO-SAC Variants. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], vol. 49, nº 16, p. 7488–7496, 18 ago. 2010b. <https://doi.org/10.1021/ie901947m>.

GONG, W.; LI, P.; ROHANI, S. Taurine in several aqueous binary solvents: Solubility prediction, measurement, modeling, solvent effect, and thermodynamics. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 367, p. 120522, dez. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120522>.

GÖRTLER, J.; KEHLBECK, R.; DEUSSEN, O. A Visual Exploration of Gaussian Processes. **Distill**, [s. l.], vol. 4, nº 4, 2 abr. 2019. <https://doi.org/10.23915/distill.00017>.

HORVÁTH, I. T.; ANASTAS, P. T. Innovations and Green Chemistry. **Chemical Reviews**, [s. l.], vol. 107, nº 6, p. 2169–2173, 1 jun. 2007. <https://doi.org/10.1021/cr078380v>.

HYSA, E.; ÇELA, A. Circularity, environment, and sustainable development. **Reference Module in Social Sciences**. [S. l.]: Elsevier, 2023. <https://doi.org/10.1016/B978-0-44-313776-1.00096-9>.

IBM. What is machine learning ? 2025. **IBM**. Disponível em: <https://www.ibm.com/think/topics/machine-learning>. Acessado em: 7 set. 2025.

JIN, H.; KIM, Y.-G.; JIN, Z.; FAN, C. Machine learning assisted prediction of the nitric oxide (NO) solubility in various deep eutectic solvents. **Journal of Industrial Information Integration**, [s. l.], vol. 43, p. 100741, jan. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.jii.2024.100741>.

KANG, S. S.; LEE, J.; KANG, J. W. An extended COSMO-SAC method for the prediction of carboxylic acid solubility. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 521, p. 112673, out. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2020.112673>.

KLAMT, A. Conductor-like Screening Model for Real Solvents: A New Approach to the Quantitative Calculation of Solvation Phenomena. **The Journal of Physical Chemistry**, [s. l.], vol. v. 99, nº n. 7, p. 2224–2235, 1995. .

KODIDE, K.; ASADI, P.; THATI, J. Solid-liquid equilibrium solubility prediction of sulfanilamide in four binary solvent mixtures by using pure solvents solubility data from 278.15 to 318.15 K with the Abraham solvation parameter model, Yalkowsky Log-Linear and extended log-linear solubility thermodynamic models. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 368, p. 120634, dez. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120634>.

KORETSKY, M. D. **Engineering and Chemical Thermodynamics**. 2nd ed. Wiley: [S.l.], 2013.

KRAVCHENKO, E.; MINKINA, T.; PRIVIZENTSEVA, D.; ZHELNIN, M.; BAUER, T.; ZHAO, Y.; SRIVASTAVA, S.; SHAN, S. Machine learning prediction of biochar properties derived from food waste. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, [s. l.], vol. 13, nº 3, 1 jun. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.116791>.

LACHOS-PEREZ, D.; BROWN, A. B.; MUDHOO, A.; TIMKO, M. T.; ROSTAGNO, M. A.; FORSTER-CARNEIRO, T. Applications of subcritical and supercritical water conditions for extraction, hydrolysis, gasification, and carbonization of biomass: a critical review. **Biofuel Research Journal**, [s. l.], vol. 4, nº 2, p. 611–626, 1 jun. 2017. <https://doi.org/10.18331/BRJ2017.4.2.6>.

LI, Y.; YALIKUN, N.; LIU, B.; WANG, Q.; ZHANG, Y.; YU, S.; GONG, H. Screening of ionic liquids for extraction of polycyclic aromatic hydrocarbons from high-temperature coal tar pitch based on COSMO-SAC model. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 426, p. 127325, maio 2025. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.127325>.

LIN, S.-T.; SANDLER, S. I. Prediction of Octanol–Water Partition Coefficients Using a Group Contribution Solvation Model. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], vol. 38, nº 10, p. 4081–4091, 1 out. 1999. <https://doi.org/10.1021/ie990391u>.

LIN, S.-T.; SANDLER, S. I. Reply to Comments on “A Priori Phase Equilibrium Prediction from a Segment Contribution Solvation Model”. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], vol. 41, nº 9, p. 2332–2334, 1 maio 2002. <https://doi.org/10.1021/ie020090b>.

LIU, B.; YU, Y.; LIU, Z.; CUI, Z.; TIAN, W. Prediction of CO₂ solubility in aqueous amine solutions using machine learning method. **Separation and Purification Technology**, [s. l.], vol. 354, 19 fev. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.129306>.

LIU, H.; ONG, Y.-S.; SHEN, X.; CAI, J. When Gaussian Process Meets Big Data: A Review of Scalable GPs. [s. l.], 9 abr. 2019. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/1807.01065>.

LUNDBERG, S.; LEE, S.-I. A Unified Approach to Interpreting Model Predictions. [s. l.], 25 nov. 2017. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/1705.07874>.

MAC FHIONNLAOICH, N.; ZEGLINSKI, J.; SIMON, M.; WOOD, B.; DAVIN, S.; GLENNON, B. A hybrid approach to aqueous solubility prediction using COSMO-RS and machine learning. **Chemical Engineering Research and Design**, [s. l.], vol. 209, p. 67–71, 1 set. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2024.07.050>.

MAHDI, W. A.; OBAIDULLAH, A. J. Combination of machine learning and COSMO-RS thermodynamic model in predicting solubility parameters of coformers in production of cocrystals for enhanced drug solubility. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, [s. l.], vol. 253, 15 out. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2024.105219>.

MAHMOUDABADI, S. Z.; PAZUKI, G. Investigation of COSMO-SAC model for solubility and cocrystal formation of pharmaceutical compounds. **Scientific Reports**, [s. l.], vol. 10, nº 1, 1 dez. 2020. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-76986-3>.

MATIĆ, M.; STUPAR, A.; PEZO, L.; ĐERIĆ ILIĆ, N.; MIŠAN, A.; TESLIĆ, N.; POJIĆ, M.; MANDIĆ, A. Eco-Friendly Extraction: A green approach to maximizing bioactive extraction from pumpkin (*Curcubita moschata* L.). **Food Chemistry: X**, [s. l.], vol. 22, p. 101290, jun. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2024.101290>.

MEI, B.; WANG, Y.; ZHOU, J.; YANG, X.; YU, Y.; XU, L.; LIU, G. Experimental and simulation study on the solubility of 1-naphthylamine in twelve neat solvents. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 408, p. 124760, ago. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.124760>.

MOLNAR, christoph. **Interpretable Machine Learning: A Guide for Making Black Box Models Explainable**. 3º ed. [S. l.: s. n.], 2025.

MONDAL, S.; SOUMYA, N. P. P.; MINI, S.; SIVAN, S. K. Bioactive compounds in functional food and their role as therapeutics. **Bioactive Compounds in Health and Disease**, [s. l.], vol. 4, nº 3, p. 24, 29 mar. 2021. <https://doi.org/10.31989/bchd.v4i3.786>.

MU, Y.; DAI, T.; FAN, J.; CHENG, Y. Prediction of acetylene solubility by a mechanism-data hybrid-driven machine learning model constructed based on COSMO-RS theory. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 414, 15 nov. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.126194>.

MULLINS, E.; OLDLAND, R.; LIU, Y.; WANG, S.; SANDLER, S. I.; CHEN, C. C.; ZWOLAK, M.; SEAVEY, K. C. Sigma-profile database for using cosmo-based thermodynamic methods. **Industrial & engineering chemistry research**, [s. l.], vol. v. 45, nº n. 12, p. 4389–4415, 2006. .

NOUBIGH, A.; AKREMI, A. Solution thermodynamics of trans-Cinnamic acid in (methanol + water) and (ethanol + water) mixtures at different temperatures. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 274, p. 752–758, jan. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.09.131>.

OKOYE, C. O.; ABHADIOMHEN, S. E.; EZENWANNE, B. C.; CHEN, X.; JIANG, H.; WU, Y.; JIANG, J. Machine learning-based predictive modeling of foodborne pathogens and antimicrobial resistance in food microbiomes using omics techniques: A systematic review. **Food Research International**, [s. l.], vol. 221, 1 dez. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2025.117255>.

OLIVEIRA, G.; WOJEICCHOWSKI, J. P.; FARIAS, F. O.; IGARASHI-MAFRA, L.; DE PELEGRINI SOARES, R.; MAFRA, M. R. Enhancement of biomolecules solubility in aqueous media using designer solvents as additives: An experimental and COSMO-based models' approach. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 318, p. 114266, nov. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114266>.

OUYANG, Z.-L.; ZOU, Z.-J.; ZOU, L. Adaptive hybrid-kernel function based Gaussian process regression for nonparametric modeling of ship maneuvering motion. **Ocean Engineering**, [s. l.], vol. 268, p. 113373, jan. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2022.113373>.

PATSAHAN, T.; PIZIO, O. Aspects of the microscopic structure of curcumin solutions with water-dimethylsulfoxide solvent. Molecular dynamics computer simulation study. **Condensed Matter Physics**, [s. l.], vol. 26, n° 3, 2023. <https://doi.org/10.5488/CMP.26.33605>.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. 3rd ed. New Jersey: Prentice Hall, 1999.

RAJGURU, K.; KAUTISH, P. Green finance: Green energy exploration and consumption. **Recent Developments in Green Finance, Green Growth and Carbon Neutrality**. [S. l.]: Elsevier, 2023. p. 281–299. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15936-7.00016-5>.

RASMUSSEN, C. E. Gaussian Processes in Machine Learning. [S. l.: s. n.], 2004. p. 63–71. https://doi.org/10.1007/978-3-540-28650-9_4.

RASMUSSEN, C. Edward.; WILLIAMS, C. K. I. . **Gaussian processes for machine learning**. [S. l.]: MIT Press, 2006.

REZAEI, H.; RAHIMPOUR, E.; ZHAO, H.; MARTINEZ, F.; BARZEGAR-JALALI, M.; JOUYBAN, A. Solubility of baclofen in some neat and mixed solvents at different temperatures. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 347, p. 118352, fev. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.118352>.

SANTIAGO, R.; SAÉNZ DE MIERA, B.; GONZÁLEZ-MIQUEL, M.; GONZÁLEZ, E. J.; RODRÍGUEZ, M.; DÍAZ, I. Anticipating APIs solubility in natural eutectic solvents: Lidocaine and caffeine case studies. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 387, p. 122727, out. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122727>.

SARI, O. F.; AMER, E.; BADER-EL-DEN, M.; INCE, V.; LEADLEY, C. AI-Driven Risk Assessment in Food Safety Using EU RASFF Database. **Food and Bioprocess Technology**, [s. l.], vol. 18, n° 7, p. 6282–6303, 2 jul. 2025. <https://doi.org/10.1007/s11947-025-03819-4>.

SAYARI, H.; ZARGHAMPOUR, A.; ZHAO, H.; HANAEE, J.; RAHIMPOUR, E.; JOUYBAN, A. Solubility study of naproxen in the binary mixture of ethanol and ethylene glycol at different temperatures. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 345, p. 118175, jan. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.118175>.

SCHMIDT, M. W.; BALDRIDGE, K. K.; BOATZ, J. A.; ELBERT, S. T.; GORDON, M. S.; JENSEN, J. H.; KOSEKI, S.; MATSUNAGA, N.; NGUYEN, K. A.; SU, S.; WINDUS, T. L.; DUPUIS, M.; MONTGOMERY, J. A. General atomic and molecular electronic structure system. **Journal of Computational Chemistry**, [s. l.], vol. 14, n° 11, p. 1347–1363, 7 nov. 1993. <https://doi.org/10.1002/jcc.540141112>.

SHAHIDI, F.; AMBIGAIPALAN, P. Phenolics and polyphenolics in foods, beverages and spices: Antioxidant activity and health effects – A review. **Journal of Functional Foods**, [s. l.], vol. 18, p. 820–897, out. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jff.2015.06.018>.

SHAYANFAR, A.; VELAGA, S.; JOUYBAN, A. Solubility of carbamazepine, nicotinamide and carbamazepine–nicotinamide cocrystal in ethanol–water mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 363, p. 97–105, fev. 2014. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2013.11.024>.

SHEKAARI, H.; MOKHTARPOUR, M.; FARAJI, S.; ZAFARANI-MOATTAR, M. T. Enhancement of curcumin solubility by some choline chloride-based deep eutectic solvents at different temperatures. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 532, p. 112917, mar. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2020.112917>.

SHOURIE, A.; VIJAYALAKSHMI, U.; SINGH, A. Bioactive compounds from microalgae. **An Integration of Phycoremediation Processes in Wastewater Treatment**. [s. l.]: Elsevier, 2022. p. 503–528. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823499-0.00021-3>.

SILVEIRA, M.; MAYER, D. A.; REBELATTO, E. A.; ARAÚJO, P. H. H.; VLADIMIR OLIVEIRA, J. Solubility and thermodynamic parameters of nicotinic acid in different solvents. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [s. l.], vol. 184, p. 107084, set. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2023.107084>.

SOARES, R. de P. The Combinatorial Term for COSMO-Based Activity Coefficient Models. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], vol. 50, nº 5, p. 3060–3063, 2 mar. 2011. <https://doi.org/10.1021/ie102087p>.

SOARES, R. de P.; BALADÃO, L. F.; STAUDT, P. B. A pairwise surface contact equation of state: COSMO-SAC-Phi. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 488, p. 13–26, jun. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.01.015>.

SPRINGER NATURE. SpringerLink. [s. d.]. Disponível em: <https://link.springer.com/>. Acessado em: 4 nov. 2024.

TIAN, Y.; WANG, X.; LIU, Y.; HU, W. Prediction of nitrogen solubility in ionic liquids by machine learning methods based on COSMO-derived descriptors. **Chemical Engineering Science**, [s. l.], vol. 284, 5 fev. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119482>.

TORRES-CARDOZO, A.; CERQUERA, N. E.; ORTIZ, C. P.; OSORIO-GALLEGO, J.; CARDENAS-TORRES, R. E.; ANGARITA-REINA, F.; MARTINEZ, F.; DELGADO, D. R. Thermodynamic analysis of the solubility of progesterone in 1-octanol + ethanol cosolvent mixtures at different temperatures. **Alexandria Engineering Journal**, [s. l.], vol. 64, p. 219–235, fev. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.08.035>.

WANG, G.; WANG, G.; GONG, J.; LI, W.; SHANG, Z.; ZHAO, S.; DONG, W.; WANG, Y. Experimental determination and computational analysis of solid–liquid phase equilibrium of nifedipine in twelve pure solvents. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [s. l.], vol. 150, p. 106223, nov. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2020.106223>.

WANG, S.; LIN, S.-T.; WATANASIRI, S.; CHEN, C.-C. Use of GAMESS/COSMO program in support of COSMO-SAC model applications in phase equilibrium prediction calculations. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 276, nº 1, p. 37–45, fev. 2009. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2008.09.021>.

WANG, Z.; ZHANG, T.; DING, H.; ZHAO, S.; FAN, Y.; QI, D.; DAI, Y.; LIU, Z. Hyperspectral imaging and machine learning-based classification and quantification of sodium saccharin in cat food powder. **Microchemical Journal**, [s. l.], vol. 218, p. 115161, nov. 2025. DOI 10.1016/j.microc.2025.115161. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0026265X25025093>.

WILEY. Wiley Online Library. [s. d.]. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/>. Acessado em: 4 nov. 2024.

WU, Y.; DI, Y.; ZHANG, X.; ZHANG, Y. Solubility determination and thermodynamic modeling of 3-methyl-4-nitrobenzoic acid in twelve organic solvents from T= (283.15–318.15) K and mixing properties of solutions. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [s. l.], vol. 102, p. 257–269, nov. 2016. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2016.07.023>.

WÜNSCHE, S.; TENBERG, V.; OLIYNYK, K.; SEIDEL-MORGENSTERN, A.; LORENZ, H.; SADEGHI, M. Experimental and model-based approach to evaluate solvent effects on the solubility of the pharmaceutical artemisinin. **European Journal of Pharmaceutical Sciences**, [s. l.], vol. 200, p. 106826, set. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2024.106826>.

XAVIER, J. R.; SANJAY, B. S.; GUPTA, D.; MEHTA, S.; CHAUHAN, O. P. Bioactive compounds of foods: Phytochemicals and peptides. **Food and Humanity**, [s. l.], vol. 3, p. 100354, dez. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.foohum.2024.100354>.

YAN, W. A robust and efficient solution for COSMO-based activity coefficient models. **Chemical Engineering Science**, [s. l.], vol. 300, p. 120652, dez. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2024.120652>.

YANG, J.; HE, W.; ZHANG, M.; HOU, J.; WU, S.; WANG, X. Solubility behavior and thermodynamic properties of caprolactam in four pure solvents and two cosolvent mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, [s. l.], vol. 582, p. 114101, jul. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2024.114101>.

YANG, Xidi; ZHU, L.; JIANG, W.; YANG, Y.; NIU, L.; ZHAO, Y.; WANG, Y.; CHEN, L.; GAN, M.; ZHU, L.; SHEN, L. Artificial intelligence-driven food quality prediction: Applying machine learning ensemble models for dynamic forecasting of pork pH and meat color changes. **Food Chemistry**, [s. l.], vol. 492, 15 nov. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.145383>.

YANG, Xin; HO, C. T.; GAO, X.; CHEN, N.; CHEN, F.; ZHU, Y.; ZHANG, X. Machine learning: An effective tool for monitoring and ensuring food safety, quality, and nutrition. **Food Chemistry**, [s. l.], vol. 477, 15 jun. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.143391>.

YAO, Y.; WANG, F.; XU, Y.; XU, Z.; CHEN, L.; WANG, J. Solubility determination and comparison of β -HMX and RDX in two binary mixed solvents (acetonitrile + water, nitric acid + water). **Chinese Journal of Chemical Engineering**, [s. l.], vol. 69, p. 238–249, maio 2024. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2023.12.016>.

YUAN, H.; YANG, J.; WANG, M.; LI, H.; LI, Y.; LI, T.; REN, B. Solubility measurement and data correlation of 2-ethoxy-1-naphthoic acid in twelve pure solvents at temperatures from 278.15 to 323.15 K. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [s. l.], vol. 200, p. 107365, jan. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2024.107365>.

ZHAI, X.; LUO, J.; SU, Q.; ZOU, Y.; WANG, Y.; ZHANG, Q.; YAN, W.; YU, Q. Solubility measurement, molecular simulations, Hansen solubility parameter and thermodynamic properties of isophthalic acid in binary solvents at 283.15–323.15 K. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [s. l.], vol. 193, p. 107276, jun. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2024.107276>.

ZHAN, A.; NIU, D.; LI, K.; LI, J. Characterization of some sucrose-based deep eutectic solvents and their effect on the solubility of piroxicam. **Journal of Molecular Liquids**, [s. l.], vol. 377, p. 121556, maio 2023. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121556>.

ZHANG, C.; XIAO, L.; WANG, J. J.; SONG, Q.; MIAO, S. Advancing microplastics detection and prediction: Integrating traditional methods with machine learning for environmental and food safety application. **Trends in Food Science and Technology**, [s. l.], vol. 159, 1 maio 2025. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2025.104964>.

ZHAO, K.; PENG, X.; HU, S.; WANG, X. Machine Learning Models for Rapid Prediction of Chemicals' Life-Cycle Environmental Impacts: Current Status, Challenges, and Future Directions. **Green Carbon**, [s. l.], ago. 2025. DOI 10.1016/j.greenca.2025.05.004. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2950155525000485>.

APÊNDICE I - CÓDIGO PARA CÁLCULO DA SOLUBILIDADE USANDO O MODELO COSMO-SAC-HB2 NO JCOSMO

```
# -----
# UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
# DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
# PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE ALIMENTOS
#
# Autor: Paulo Vitor de Lima Carvalho
# Orientadora: Prof(a). Dr(a). Grazielle de Oliveira.
# Coorientadora: Prof(a). Dr(a). Agnes de Paula Scheer.
#
# Cálculo da solubilidade predita por COSMO-SAC-HB2 via JCOSMO
#
# Este código realiza o cálculo da fração molar predita (x_cosmo)
# comparando-a com dados experimentais (x0_exp), utilizando o modelo
# COSMO-SAC-HB2 com o gateway JCOSMO em Python.
#
# Desenvolvido com base em exemplos fornecidos por:
# * Ferrarini et al. (2018), AIChE J. DOI:10.1002/aic.16194
# * Soares e Gerber (2013), Ind. Eng. Chem. Res. DOI:10.1021/ie400170a
# * Soares et al. (2013), Ind. Eng. Chem. Res. DOI:10.1021/ie4013979
# * Gerber e Soares (2013), Braz. J. Chem. Eng. DOI:10.1590/S0104-
66322013000100002
# -----

import pandas as pd
import numpy as np
import math
from py4j.java_gateway import JavaGateway

# Constantes da substância, nesse caso exemplo Cafeína (CAFFEINE)
# Referência: DOI:10.1016/j.jct.2006.05.009
delta_H_fus = 19860 # J/mol
T_fus = 509.5 # K
R = 8.314 # J/mol·K
tol = 1e-10 # tolerância para critério de convergência

# Leitura da planilha de dados experimentais
df = pd.read_excel("CAFFEINE.xlsx") # Nome da planilha deve alterado conforme
necessário
df.columns = [col.strip().lower() for col in df.columns]

# Inicializar o gateway Java e o modelo COSMO-SAC-HB2
gateway = JavaGateway(auto_field=True)
JCOSMO = gateway.entry_point
model = JCOSMO.newModel('COSMO-SAC-HB2 (GAMESS)')

# Lista para armazenar os resultados
resultados = []

# Loop sobre os dados experimentais
for _, row in df.iterrows():
    T = row['temperature']
    x_exp = row['x0'] # valor experimental
    x1_ratio = row['x1'] # razão molar solvente 1
    x2_ratio = row['x2'] if 'x2' in row else 0.0 # razão molar solvente 2 (se
    houver)
```

```

solventes = row['solvent'].split(';')
molar_ratios = [x1_ratio]
if len(solventes) == 2:
    molar_ratios.append(x2_ratio)

# Preparar arrays para composição e nomes dos compostos
ncomps = 1 + len(solventes)
comps_array = gateway.new_array(gateway.jvm.java.lang.String, ncomps)
x_array = gateway.new_array(gateway.jvm.double, ncomps)

comps_array[0] = 'CAFFEINE' # nome do soluto (ajustável)
for i, s in enumerate(solventes):
    comps_array[i + 1] = s.strip()

model.setCompounds(comps_array)
model.setTemperature(T)

# Constante de equilíbrio sólido-líquido (SLE)
termo = (delta_H_fus / R) * (1 / T_fus - 1 / T)

# Método iterativo para cálculo da fração molar predita
x_soluto = x_exp # chute inicial
erro = 1

while abs(erro) > tol:
    for i, ratio in enumerate(molar_ratios):
        x_array[i + 1] = ratio * (1 - x_soluto)
    x_array[0] = x_soluto

    model.setComposition(x_array)
    lnGamma = model.activityCoefficientLn()
    ln_gamma_soluto = lnGamma[0]

    x_calc = math.exp(termo - ln_gamma_soluto)
    erro = x_calc - x_soluto
    x_soluto += 0.2 * erro # fator de relaxamento

# Armazenar resultado
x_cosmo = x_soluto
resultados.append({
    'temperature': T,
    'solvent': ';'.join(solventes),
    'x0_exp': x_exp,
    'x1': x1_ratio,
    'x2': x2_ratio if len(solventes) == 2 else '',
    'ln_gamma': ln_gamma_soluto,
    'x_cosmo': x_cosmo,
    'desvio²': (x_exp - x_cosmo)**2
})

# Exportar resultados para Excel
df_out = pd.DataFrame(resultados)
df_out.to_excel("CAFFEINE_resultado_ITERATIVO.xlsx", index=False)
print("Arquivo salvo como 'CAFFEINE_resultado_ITERATIVO.xlsx'")

```

APÊNDICE II – CÓDIGO-FONTE PARA CORREÇÃO DOS DADOS DE SOLUBILIDADE VIA GPR (GAUSSIAN PROCESS REGRESSION)

```
# -----
# UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
# DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
# PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE ALIMENTOS
#
# Autor: Paulo Vitor de Lima Carvalho
# Orientadora: Prof(a). Dr(a). Grazielle de Oliveira.
# Coorientadora: Prof(a). Dr(a). Agnes de Paula Scheer.
#
# Correção da predição de solubilidade via regressão por processo gaussiano
# (GPR)
#
# O código treina um modelo GPR com dados experimentais e corrige as
# predições
# feitas pelo modelo COSMO-SAC-HB2, reduzindo o desvio quadrático.
#
# Desenvolvido com base em exemplos fornecidos por:
# (Oliveira et al., 2026) DOI:10.1016/j.fluid.2025.114535
# -----

import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.gaussian_process.kernels import RBF
from sklearn.gaussian_process import GaussianProcessRegressor

# Leitura dos dados de treinamento
url = 'data2.csv'
names = ['Temp', 'Log10_K_OW_solute', 'x_1', 'x_2', 'WALK_mix', 'x_COSMO',
'dev_exp']
dataset = pd.read_csv(url, names=names)
array = dataset.values
nl = len(array[:, 0])
nc = len(array[0, :])
Xy = array[:, 0:nc]
Xy_aux = Xy.copy()

# Função para normalizar colunas
def normalize_columns(matrix):
    normalized_matrix = np.copy(matrix)
    for col in range(matrix.shape[1]):
        min_val = np.min(matrix[:, col])
        max_val = np.max(matrix[:, col])
        normalized_matrix[:, col] = (matrix[:, col] - min_val) / (max_val -
min_val)
    return normalized_matrix

Xy = normalize_columns(Xy)
X_train = Xy[:, 0:nc-1]
y_train = Xy[:, nc-1]

# Definir o kernel e treinar o modelo GPR
kernel = 243**2 * RBF(length_scale=[7.85, 0.131, 43.7, 98, 0.0396, 0.507])
gp = GaussianProcessRegressor(kernel=kernel, alpha=8.18e1, optimizer=None)
reg = gp.fit(X_train, y_train)
```

```

# Armazenar min/max para normalização dos novos dados
min_Temp, max_Temp = np.min(Xy_aux[:, 0]), np.max(Xy_aux[:, 0])
min_OW_solute, max_OW_solute = np.min(Xy_aux[:, 1]), np.max(Xy_aux[:, 1])
min_x1, max_x1 = np.min(Xy_aux[:, 2]), np.max(Xy_aux[:, 2])
min_x2, max_x2 = np.min(Xy_aux[:, 3]), np.max(Xy_aux[:, 3])
min_OW_mix, max_OW_mix = np.min(Xy_aux[:, 4]), np.max(Xy_aux[:, 4])
min_x_pred_COSMO, max_x_pred_COSMO = np.min(Xy_aux[:, 5]), np.max(Xy_aux[:, 5])
min_deviation, max_deviation = np.min(Xy_aux[:, 6]), np.max(Xy_aux[:, 6])

# Leitura dos novos dados a serem corrigidos
df_new = pd.read_excel("BENZOIC_ACID.xlsx")

# Normalizar os dados com base nos min/max do treino
Temp_norm = (df_new['temperature'] - min_Temp) / (max_Temp - min_Temp)
OW_solute_norm = (df_new['Log_KOW_solute'] - min_OW_solute) / (max_OW_solute - min_OW_solute)
x1_norm = (df_new['x1'] - min_x1) / (max_x1 - min_x1)
x2_norm = (df_new['x2'] - min_x2) / (max_x2 - min_x2)
OW_mix_norm = (df_new['WALK_mix'] - min_OW_mix) / (max_OW_mix - min_OW_mix)
x_pred_COSMO_norm = (df_new['x_cosmo'] - min_x_pred_COSMO) / (max_x_pred_COSMO - min_x_pred_COSMO)

# Construção do vetor de entrada para predição
X_new = np.column_stack([
    Temp_norm,
    OW_solute_norm,
    x1_norm,
    x2_norm,
    OW_mix_norm,
    x_pred_COSMO_norm
])

# Predição do desvio e correção da solubilidade
y_pred = reg.predict(X_new)
deviation = y_pred * (max_deviation - min_deviation) + min_deviation

# Corrigir x_cosmo e salvar nova coluna
df_new['x_pred_GPR'] = (df_new['x_cosmo'] - deviation).clip(lower=1e-12)

# Salvar os resultados corrigidos em um novo arquivo Excel
df_new.to_excel("BENZOIC_ACID_corrigido.xlsx", index=False)
print("Arquivo salvo: BENZOIC_ACID_corrigido.xlsx")

```

**APÊNDICE III – TABELA COM A BASE DE DADOS EXPERIMENTAIS E RESULTADOS PREDITOS PELOS MODELOS
COSMO-SAC-HB2 E GPR**

(Continua)

Soluto	Base de dados				Resultados			
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	273,15	Puro	1,4824	0,7710	0,4897	0,3896	0,3896
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	278,15	Puro	1,4824	0,7710	0,5284	0,4275	0,4606
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	1,4824	0,7710	0,5702	0,4688	0,5276
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	288,15	Puro	1,4824	0,7710	0,6108	0,5137	0,6134
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	1,4824	0,7710	0,6601	0,5629	0,6722
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	298,15	Puro	1,4824	0,7710	0,7283	0,6170	0,7433
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	1,4824	0,7710	0,7882	0,6770	0,8204
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de Etila	308,15	Puro	1,4824	0,7710	0,8631	0,7439	0,8692
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	273,15	Puro	1,4824	1,9329	0,4407	0,3638	0,4350
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	278,15	Puro	1,4824	1,9329	0,4853	0,4042	0,4830
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	283,15	Puro	1,4824	1,9329	0,5320	0,4482	0,5333
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	288,15	Puro	1,4824	1,9329	0,5845	0,4962	0,5871
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	293,15	Puro	1,4824	1,9329	0,6448	0,5486	0,6433
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	298,15	Puro	1,4824	1,9329	0,7060	0,6060	0,7072
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	303,15	Puro	1,4824	1,9329	0,7767	0,6692	0,7740
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetato de N-Butila	308,15	Puro	1,4824	1,9329	0,8494	0,7391	0,8531
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	273,15	Puro	1,4824	0,1197	0,5525	0,4022	0,5331
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	278,15	Puro	1,4824	0,1197	0,5902	0,4381	0,5871
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	283,15	Puro	1,4824	0,1197	0,6360	0,4773	0,6370
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	288,15	Puro	1,4824	0,1197	0,6840	0,5203	0,6898
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	293,15	Puro	1,4824	0,1197	0,7244	0,5677	0,7402
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	298,15	Puro	1,4824	0,1197	0,7777	0,6202	0,7869
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	303,15	Puro	1,4824	0,1197	0,8388	0,6788	0,8393

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetona	308,15	Puro	1,4824	0,1197	0,8978	0,7447	0,8782
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	273,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,5274	0,3383	0,4631
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	278,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,5717	0,3785	0,5328
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	283,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,6191	0,4230	0,5894
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	288,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,6580	0,4724	0,6550
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	293,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,7075	0,5270	0,7178
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	298,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,7665	0,5874	0,7911
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	303,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,8294	0,6544	0,8612
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Acetonitrila	308,15	Puro	1,4824	-0,3054	0,8781	0,7288	0,9464
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	278,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0076	0,0062	0,0064
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	283,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0099	0,0363	0,0105
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	288,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0140	0,0499	0,0142
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	293,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0185	0,0708	0,0165
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	298,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0263	0,1075	0,0222
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	303,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0364	0,2056	0,0604
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Cicloexano	308,15	Puro	1,4824	3,8002	0,0621	0,5666	0,2927
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	273,15	Puro	1,4824	0,2310	0,1331	0,1781	0,1509
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	278,15	Puro	1,4824	0,2310	0,1761	0,2169	0,1853
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	283,15	Puro	1,4824	0,2310	0,2314	0,2642	0,2412
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	288,15	Puro	1,4824	0,2310	0,3228	0,3218	0,3086
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	293,15	Puro	1,4824	0,2310	0,4309	0,3913	0,4138
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	298,15	Puro	1,4824	0,2310	0,5547	0,4736	0,5488
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	303,15	Puro	1,4824	0,2310	0,6981	0,5684	0,6904
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Etanol	308,15	Puro	1,4824	0,2310	0,8333	0,6731	0,8500
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	273,15	Puro	1,4824	1,3683	0,0584	0,1105	0,0464
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	278,15	Puro	1,4824	1,3683	0,0819	0,1901	0,0872
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	283,15	Puro	1,4824	1,3683	0,1176	0,2399	0,1184
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	288,15	Puro	1,4824	1,3683	0,1565	0,3025	0,1817

(Continuação)

Soluto	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	$\log K_{ow,soluto}$	$WALK_{mix}$	X_{exp}	X_{cosmo}	X_{GPR}
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	293,15	Puro	1,4824	1,3683	0,2513	0,3793	0,2659
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	298,15	Puro	1,4824	1,3683	0,3816	0,4697	0,4129
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	303,15	Puro	1,4824	1,3683	0,5847	0,5706	0,6012
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isobutanol	308,15	Puro	1,4824	1,3683	0,8414	0,6779	0,8164
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	273,15	Puro	1,4824	0,7234	0,0524	0,1717	0,0521
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	278,15	Puro	1,4824	0,7234	0,0814	0,2110	0,0864
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	283,15	Puro	1,4824	0,7234	0,1234	0,2591	0,1303
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	288,15	Puro	1,4824	0,7234	0,1982	0,3177	0,2256
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	293,15	Puro	1,4824	0,7234	0,2942	0,3884	0,3325
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	298,15	Puro	1,4824	0,7234	0,4614	0,4718	0,4913
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	303,15	Puro	1,4824	0,7234	0,6372	0,5672	0,6096
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Isopropanol	308,15	Puro	1,4824	0,7234	0,8454	0,6724	0,7338
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	273,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,1921	0,1869	0,2116
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	278,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,2452	0,2237	0,2503
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	283,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,2957	0,2687	0,3208
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	288,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,3748	0,3239	0,4023
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	293,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,4766	0,3916	0,4964
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	298,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,5910	0,4732	0,6038
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	303,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,7025	0,5683	0,6995
1-Naftilamina ⁽¹⁾	Metanol	308,15	Puro	1,4824	-0,3364	0,8448	0,6738	0,7874
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	273,15	Puro	1,4824	1,3176	0,1118	0,1443	0,1146
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	278,15	Puro	1,4824	1,3176	0,1451	0,1803	0,1376
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	283,15	Puro	1,4824	1,3176	0,1943	0,2260	0,1784
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	288,15	Puro	1,4824	1,3176	0,2468	0,2838	0,2445
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	293,15	Puro	1,4824	1,3176	0,3531	0,3564	0,3217
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	298,15	Puro	1,4824	1,3176	0,4869	0,4451	0,4605
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	303,15	Puro	1,4824	1,3176	0,6643	0,5486	0,6438
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Butanol	308,15	Puro	1,4824	1,3176	0,8404	0,6620	0,8862

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	273,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0055	0,0195	0,0064
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	278,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0073	0,0256	0,0141
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	283,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0088	0,0336	0,0182
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	288,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0116	0,0216	0,0099
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	293,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0156	0,0592	0,0258
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	298,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0205	0,0803	0,0281
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	303,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0260	0,1133	0,0286
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Heptano	308,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0346	0,1762	0,0185
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	273,15	Puro	1,4824	0,8164	0,0925	0,1593	0,0978
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	278,15	Puro	1,4824	0,8164	0,1329	0,1974	0,1298
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	283,15	Puro	1,4824	0,8164	0,1813	0,2449	0,1859
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	288,15	Puro	1,4824	0,8164	0,2555	0,3038	0,2759
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	293,15	Puro	1,4824	0,8164	0,3655	0,3760	0,3996
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	298,15	Puro	1,4824	0,8164	0,5116	0,4622	0,5614
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	303,15	Puro	1,4824	0,8164	0,6693	0,5611	0,7146
1-Naftilamina ⁽¹⁾	N-Propanol	308,15	Puro	1,4824	0,8164	0,8376	0,6695	0,7674
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	278,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0151	0,0670	0,0235
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0174	0,0774	0,0267
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	288,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0204	0,0887	0,0333
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0239	0,1010	0,0381
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	298,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0279	0,1143	0,0427
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0331	0,1286	0,0563
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	308,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0380	0,1440	0,0599
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	313,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0447	0,1605	0,0696
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	318,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0526	0,1782	0,0904
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Etila	323,15	Puro	2,0453	0,7710	0,0606	0,1971	0,1134
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	278,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0118	0,0582	0,0109
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	283,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0136	0,0336	0,0092

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	288,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0155	0,0785	0,0186	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	293,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0185	0,0901	0,0258	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	298,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0213	0,1029	0,0311	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	303,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0245	0,1167	0,0325	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	308,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0290	0,1318	0,0439	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	313,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0333	0,1480	0,0463	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	318,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0389	0,1655	0,0523	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Isopropila	323,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0455	0,1843	0,0723	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	278,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0153	0,0764	0,0272	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	283,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0181	0,0869	0,0323	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	288,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0215	0,0983	0,0398	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	293,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0254	0,1105	0,0453	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	298,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0301	0,1237	0,0501	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	303,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0366	0,1378	0,0618	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	308,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0417	0,1529	0,0754	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	313,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0495	0,1690	0,0810	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	318,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0587	0,1863	0,1046	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de Metila	323,15	Puro	2,0453	0,1880	0,0693	0,2047	0,1271	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	278,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0129	0,1287	0,0115	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	283,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0149	0,0681	0,0140	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	288,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0177	0,0788	0,0182	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	293,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0204	0,0905	0,0221	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	298,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0240	0,1034	0,0273	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	303,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0280	0,1173	0,0295	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	308,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0322	0,1325	0,0359	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	313,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0381	0,1488	0,0432	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	318,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0446	0,1664	0,0504	
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetato de N-Propila	323,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0516	0,1853	0,0589	

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	278,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0535	0,0945	0,0449
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	283,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0606	0,1058	0,0389
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	288,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0691	0,1177	0,0471
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	293,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0782	0,1304	0,0567
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	298,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0890	0,1439	0,0750
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	303,15	Puro	2,0453	0,1197	0,0994	0,1583	0,0849
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	308,15	Puro	2,0453	0,1197	0,1119	0,1734	0,0992
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	313,15	Puro	2,0453	0,1197	0,1271	0,1895	0,1153
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	318,15	Puro	2,0453	0,1197	0,1416	0,2066	0,1337
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetona	323,15	Puro	2,0453	0,1197	0,1585	0,2247	0,1667
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	278,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0062	0,0083	0,0058
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	283,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0075	0,0535	0,0038
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	288,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0092	0,0062	0,0090
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	293,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0110	0,0733	0,0084
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	298,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0135	0,0848	0,0136
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	303,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0165	0,0976	0,0238
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	308,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0220	0,1116	0,0380
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	313,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0254	0,1269	0,0479
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	318,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0308	0,1437	0,0699
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Acetonitrila	323,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0378	0,1619	0,1009
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	278,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0268	0,0544	0,0230
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	283,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0325	0,0643	0,0331
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	288,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0392	0,0747	0,0282
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	293,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0469	0,0865	0,0294
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	298,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0565	0,0994	0,0379
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	303,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0688	0,1135	0,0417
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	308,15	Puro	2,0453	0,2310	0,0836	0,1289	0,0500
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	313,15	Puro	2,0453	0,2310	0,1007	0,1456	0,0668

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	318,15	Puro	2,0453	0,2310	0,1190	0,1636	0,0838
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Etanol	323,15	Puro	2,0453	0,2310	0,1364	0,1830	0,0877
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	278,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0111	0,0285	0,0076
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	283,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0138	0,0350	0,0130
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	288,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0172	0,0428	0,0178
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	293,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0208	0,0518	0,0227
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	298,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0256	0,0621	0,0283
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	303,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0322	0,0740	0,0328
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	308,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0397	0,0875	0,0371
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	313,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0508	0,1027	0,0372
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	318,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0623	0,1196	0,0418
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isobutanol	323,15	Puro	2,0453	1,3683	0,0779	0,1384	0,0440
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	278,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0148	0,0536	0,0099
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	283,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0181	0,0634	0,0128
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	288,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0229	0,1411	0,0233
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	293,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0287	0,0867	0,0236
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	298,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0360	0,1001	0,0285
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	303,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0459	0,1149	0,0364
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	308,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0580	0,1309	0,0450
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	313,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0733	0,1483	0,0560
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	318,15	Puro	2,0453	0,7234	0,0901	0,1669	0,0622
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Isopropanol	323,15	Puro	2,0453	0,7234	0,1180	0,1870	0,0776
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	278,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0304	0,0584	0,0348
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	283,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0370	0,0675	0,0378
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	288,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0443	0,0774	0,0429
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	293,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0552	0,0883	0,0431
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	298,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0671	0,1002	0,0536
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	303,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0821	0,1131	0,0590

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	308,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,0951	0,1272	0,0788
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	313,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,1144	0,1426	0,0854
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	318,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,1337	0,1593	0,1070
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	Metanol	323,15	Puro	2,0453	-0,3364	0,1509	0,1773	0,1254
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	278,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0174	0,0317	0,0127
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	283,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0205	0,0387	0,0193
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	288,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0248	0,0469	0,0224
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	293,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0296	0,0564	0,0299
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	298,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0356	0,0673	0,0358
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	303,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0431	0,0798	0,0453
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	308,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0520	0,0938	0,0544
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	313,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0632	0,1095	0,0652
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	318,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0744	0,1270	0,0779
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Pentanol	323,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0902	0,1464	0,0925
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	278,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0212	0,0424	0,0164
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	283,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0236	0,0510	0,0196
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	288,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0283	0,0606	0,0231
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	293,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0345	0,0716	0,0304
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	298,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0424	0,0838	0,0329
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	303,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0511	0,0974	0,0421
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	308,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0632	0,1124	0,0478
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	313,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0779	0,1289	0,0551
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	318,15	Puro	2,0453	0,8164	0,0920	0,1468	0,0654
Ácido 2-Etoxi-1-Naftoico ⁽²⁾	N-Propanol	323,15	Puro	2,0453	0,8164	0,1135	0,1664	0,0746
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	283,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0407	0,2807	0,0430
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	285,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0428	0,2854	0,0438
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	288,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0448	0,2903	0,0469
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	290,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0469	0,2951	0,0489

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	293,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0493	0,3000	0,0502	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	295,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0519	0,3050	0,0523	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	298,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0545	0,3101	0,0556	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	300,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0571	0,3151	0,0575	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	303,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0600	0,3203	0,0606	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	305,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0628	0,3255	0,0633	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	308,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0658	0,3308	0,0660	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	310,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0688	0,3361	0,0689	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	313,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0718	0,3415	0,0724	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	315,65	Puro	0,2707	1,0866	0,0754	0,3470	0,0751	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	1,4-Dioxano	318,15	Puro	0,2707	1,0866	0,0802	0,3526	0,0785	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0106	0,0081	0,0073	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	285,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0111	0,0915	0,0132	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	288,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0116	0,0963	0,0120	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	290,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0123	0,1012	0,0131	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0128	0,1062	0,0128	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	295,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0134	0,1114	0,0130	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	298,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0140	0,0209	0,0106	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	300,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0146	0,1223	0,0139	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0153	0,1279	0,0146	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	305,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0160	0,1337	0,0149	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	308,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0167	0,1397	0,0150	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	310,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0175	0,1458	0,0156	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	313,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0185	0,1521	0,0158	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	315,65	Puro	0,2707	0,7710	0,0194	0,1585	0,0165	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetato de Etila	318,15	Puro	2,0453	1,8469	0,0205	0,0387	0,0193	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	283,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0204	0,1258	0,0203	
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	285,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0212	0,1308	0,0208	

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	288,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0220	0,1359	0,0221
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	290,65	Puro	2,0453	0,7234	0,0229	0,1411	0,0233
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	293,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0238	0,1464	0,0226
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	295,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0247	0,1519	0,0233
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	298,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0260	0,1574	0,0240
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	300,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0273	0,1630	0,0247
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	303,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0286	0,1688	0,0260
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	305,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0299	0,1746	0,0258
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	308,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0311	0,1806	0,0266
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	310,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0325	0,1867	0,0275
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	313,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0339	0,1930	0,0304
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	315,65	Puro	0,2707	0,1197	0,0354	0,1993	0,0305
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetona	318,15	Puro	0,2707	0,1197	0,0372	0,2058	0,0318
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	283,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0025	0,0799	0,0013
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	285,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0028	0,0844	0,0027
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	288,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0030	0,0891	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	290,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0033	0,0939	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	293,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0035	0,0989	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	295,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0038	0,0286	0,0041
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	298,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0041	0,1092	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	300,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0044	0,1147	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	303,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0047	0,1202	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	305,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0050	0,1260	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	308,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0053	0,1319	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	310,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0056	0,1379	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	313,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0060	0,1442	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	315,65	Puro	0,2707	-0,3054	0,0064	0,1505	0,0000
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Acetonitrila	318,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0069	0,1571	0,0000

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	283,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0075	0,1002	0,0058
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	285,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0078	0,1057	0,0068
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	288,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0082	0,1114	0,0081
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	290,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0087	0,1173	0,0098
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	293,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0092	0,1233	0,0106
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	295,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0096	0,1294	0,0116
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	298,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0102	0,1357	0,0130
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	300,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0108	0,1421	0,0135
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	303,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0113	0,1487	0,0155
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	305,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0119	0,1554	0,0185
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	308,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0125	0,1622	0,0191
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	310,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0136	0,1692	0,0215
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	313,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0138	0,1764	0,0250
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	315,65	Puro	0,2707	0,2310	0,0146	0,1836	0,0272
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Etanol	318,15	Puro	0,2707	0,2310	0,0155	0,1910	0,0313
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	283,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0088	0,0941	0,0075
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	285,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0091	0,0996	0,0091
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	288,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0097	0,1052	0,0096
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	290,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0102	0,1110	0,0094
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	293,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0108	0,1170	0,0112
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	295,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0115	0,1231	0,0115
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	298,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0122	0,1294	0,0123
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	300,65	Puro	2,0453	1,3357	0,0129	0,1287	0,0115
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	303,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0136	0,0336	0,0092
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	305,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0143	0,1491	0,0149
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	308,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0151	0,1560	0,0156
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	310,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0161	0,1630	0,0172
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	313,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0169	0,1702	0,0177

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	315,65	Puro	0,2707	0,7234	0,0181	0,1775	0,0201
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Isopropanol	318,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0192	0,1850	0,0220
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	283,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0061	0,1141	0,0085
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	285,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0066	0,1194	0,0097
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	288,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0073	0,1249	0,0100
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	290,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0081	0,1304	0,0105
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	293,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0088	0,1361	0,0108
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	295,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0096	0,1419	0,0113
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	298,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0104	0,1478	0,0137
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	300,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0111	0,1539	0,0139
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	303,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0120	0,1601	0,0158
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	305,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0129	0,1664	0,0176
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	308,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0137	0,1728	0,0186
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	310,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0147	0,1794	0,0216
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	313,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0158	0,1860	0,0232
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	315,65	Puro	0,2707	-0,3364	0,0169	0,1929	0,0252
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Metanol	318,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0184	0,1998	0,0296
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	283,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,0677	0,2150	0,0774
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	285,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,0709	0,2203	0,0797
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	288,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,0754	0,2257	0,0837
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	290,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,0795	0,2311	0,0877
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	293,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,0845	0,2366	0,0916
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	295,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,0907	0,2422	0,0963
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	298,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,0975	0,2478	0,1012
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	300,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,1044	0,2535	0,1038
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	303,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,1109	0,0094	0,1008
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	305,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,1182	0,2650	0,1157
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	308,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,1261	0,2709	0,1211

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	310,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,1348	0,2769	0,1260
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	313,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,1424	0,2830	0,1323
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	315,65	Puro	0,2707	-0,4059	0,1516	0,2891	0,1328
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N,N-Dimetilformamida	318,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,1622	0,2953	0,1383
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	283,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0068	0,0599	0,0063
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	285,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0073	0,0643	0,0073
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	288,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0079	0,0689	0,0080
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	290,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0084	0,0738	0,0087
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	293,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0091	0,0788	0,0095
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	295,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0099	0,0841	0,0103
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	298,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0108	0,0896	0,0113
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	300,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0116	0,0954	0,0121
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	303,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0125	0,1013	0,0132
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	305,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0134	0,1075	0,0142
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	308,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0144	0,1139	0,0146
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	310,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0153	0,1205	0,0163
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	313,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0163	0,1273	0,0170
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	315,65	Puro	0,2707	1,3176	0,0174	0,1344	0,0180
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Butanol	318,15	Puro	0,2707	1,3176	0,0188	0,1416	0,0199
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	283,15	Puro	0,2707	0,2849	0,0856	0,2270	0,0816
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	285,65	Puro	0,2707	0,2849	0,0872	0,2321	0,0847
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	288,15	Puro	0,2707	0,2849	0,0900	0,2372	0,0859
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	290,65	Puro	0,2707	0,2849	0,0933	0,2424	0,0896
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	293,15	Puro	0,2707	0,2849	0,0965	0,2476	0,0934
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	295,65	Puro	0,2707	0,2849	0,1003	0,2530	0,0984
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	298,15	Puro	0,2707	0,2849	0,1047	0,2584	0,1016
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	300,65	Puro	0,2707	0,2849	0,1089	0,2638	0,1060
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	303,15	Puro	0,2707	0,2849	0,1132	0,2693	0,1104

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	305,65	Puro	0,2707	0,2849	0,1177	0,2750	0,1153
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	308,15	Puro	0,2707	0,2849	0,1226	0,2806	0,1193
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	310,65	Puro	0,2707	0,2849	0,1277	0,2864	0,1245
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	313,15	Puro	0,2707	0,2849	0,1328	0,2923	0,1293
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	315,65	Puro	0,2707	0,2849	0,1382	0,2982	0,1341
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Metilpirrolidona	318,15	Puro	0,2707	0,2849	0,1447	0,3042	0,1398
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	283,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0073	0,0715	0,0103
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	285,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0077	0,0764	0,0097
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	288,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0081	0,0814	0,0108
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	290,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0087	0,0866	0,0105
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	293,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0091	0,0921	0,0112
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	295,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0097	0,0977	0,0107
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	298,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0103	0,1035	0,0111
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	300,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0109	0,1095	0,0109
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	303,15	Puro	1,4824	5,0253	0,0116	0,0216	0,0099
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	305,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0121	0,1221	0,0123
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	308,15	Puro	2,0453	1,3357	0,0129	0,1287	0,0115
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	310,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0137	0,1355	0,0129
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	313,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0145	0,1425	0,0132
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	315,65	Puro	0,2707	0,8164	0,0155	0,0261	0,0119
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	N-Propanol	318,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0164	0,1570	0,0130
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	283,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0165	0,0017	0,0190
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	285,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0174	0,0019	0,0196
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	288,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0184	0,0021	0,0202
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	290,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0191	0,0024	0,0208
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	293,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0202	0,0027	0,0212
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	295,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0212	0,0030	0,0221
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	298,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0222	0,0034	0,0228

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	300,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0231	0,0038	0,0234
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	303,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0243	0,0042	0,0245
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	305,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0253	0,0693	0,0159
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	308,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0265	0,0052	0,0256
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	310,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0279	0,0058	0,0264
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	313,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0295	0,0065	0,0279
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	315,65	Puro	0,2707	2,7532	0,0314	0,0072	0,0283
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	318,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0333	0,0079	0,0294
Ácido 2-Metil-3-Nitrobenzóico ⁽³⁾	Tolueno	288,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0577	0,1812	0,0526
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	293,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0668	0,1992	0,0590
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	298,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0703	0,2180	0,0662
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	303,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0811	0,2377	0,0737
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	308,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0895	0,2582	0,0862
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	313,15	Puro	0,7766	0,2310	0,0979	0,2795	0,0986
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	318,15	Puro	0,7766	0,2310	0,1110	0,3018	0,1129
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	323,15	Puro	0,7766	0,2310	0,1225	0,3250	0,1325
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol	328,15	Puro	0,7766	0,2310	0,1331	0,3492	0,1601
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0000	0,0019	0,0002
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0005	0,0141	0,0005
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0033	0,0208	0,0020
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0068	0,0696	0,0059
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0141	0,0950	0,0156
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0190	0,1156	0,0195
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0252	0,1325	0,0233
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	288,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0408	0,1591	0,0492
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,0;1,0	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0024	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0006	0,0177	0,0005
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0041	0,0495	0,0025

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0090	0,0832	0,0087
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0172	0,1109	0,0187
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0229	0,1327	0,0228
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0298	0,1503	0,0261
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	293,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0475	0,1774	0,0533
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,0;1,0	0,7719	-1,6254	0,0000	0,0031	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0009	0,0223	0,0007
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0051	0,0608	0,0032
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0135	0,0989	0,0096
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0203	0,1285	0,0227
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0265	0,1513	0,0275
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0351	0,1693	0,0303
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	298,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0556	0,1966	0,0604
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0039	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0012	0,0282	0,0008
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0066	0,0748	0,0039
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0150	0,1169	0,0116
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0250	0,1480	0,0267
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0322	0,1714	0,0325
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0414	0,1896	0,0379
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	303,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0641	0,2168	0,0671
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0049	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0016	0,0359	0,0011
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0083	0,0919	0,0046
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0184	0,1373	0,0139
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0303	0,1694	0,0316
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0385	0,1929	0,0379
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0488	0,2111	0,0443

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	308,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0749	0,2380	0,0752
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0062	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0021	0,0464	0,0014
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0107	0,1126	0,0047
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0255	0,1602	0,0200
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0368	0,1925	0,0374
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0459	0,2159	0,0454
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0576	0,2339	0,0530
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	313,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0850	0,2602	0,0851
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0002	0,0078	0,0002
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0028	0,0610	0,0020
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0138	0,1372	0,0051
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0331	0,1856	0,0243
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0456	0,2174	0,0446
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0559	0,2403	0,0530
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0678	0,2578	0,0647
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	318,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,0994	0,2833	0,1005
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0002	0,0100	0,0004
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0039	0,0819	0,0029
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0178	0,1659	0,0079
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0433	0,2133	0,0250
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0560	0,2440	0,0533
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0674	0,2661	0,0631
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0799	0,2830	0,0780
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	323,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,1155	0,3075	0,1124
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0003	0,0130	0,0009
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5123	0,0052	0,1118	0,0037
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0230	0,1982	0,0078

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,3;0,7	0,7766	-1,1249	0,0537	0,2432	0,0315
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,4;0,6	0,7766	-0,9312	0,0686	0,2723	0,0646
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,5;0,5	0,7766	-0,7375	0,0872	0,2933	0,0737
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,6;0,4	0,7766	-0,5438	0,0941	0,3094	0,0932
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Etanol;Água	328,15	0,8;0,2	0,7766	-0,1564	0,1259	0,3327	0,1294
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	288,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0531	0,1848	0,0498
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	293,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0580	0,2017	0,0534
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	298,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0643	0,2195	0,0599
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	303,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0699	0,2381	0,0668
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	308,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0789	0,2576	0,0746
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	313,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0866	0,2781	0,0858
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	318,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,0966	0,2996	0,0982
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	323,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,1060	0,3221	0,1126
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol	328,15	Puro	0,7766	-0,3364	0,1151	0,3457	0,1348
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0000	0,0019	0,0002
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,1;0,9	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0001	0,0252	0,0002
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0007	0,0491	0,0016
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0036	0,0748	0,0051
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0126	0,0988	0,0121
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0220	0,1200	0,0212
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	288,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0234	0,1554	0,0242
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,0;1,0	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0024	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0000	0,0113	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0001	0,0315	0,0010
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0009	0,0598	0,0025
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0045	0,0888	0,0069
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0153	0,1145	0,0150

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0262	0,1366	0,0244
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	293,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0280	0,1726	0,0276
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,0;1,0	0,7719	-1,6254	0,0000	0,0031	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,1;0,9	-0,2190	0,2310	0,0000	0,0142	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0002	0,0393	0,0010
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0011	0,0728	0,0027
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0054	0,1048	0,0082
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0179	0,1320	0,0183
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0288	0,1547	0,0283
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	298,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0318	0,1909	0,0345
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0039	0,0000
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0001	0,0180	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0003	0,0494	0,0017
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0014	0,0884	0,0037
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0068	0,1230	0,0110
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0219	0,1512	0,0223
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0342	0,1743	0,0330
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	303,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0383	0,2103	0,0406
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0049	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0001	0,0230	0,0004
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0004	0,0623	0,0022
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,3;0,7	0,7719	-1,1615	0,0018	0,1070	0,0047
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0084	0,1436	0,0141
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0263	0,1723	0,0272
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0393	0,1953	0,0393
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	308,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0450	0,2307	0,0481
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0001	0,0062	0,0001
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0001	0,0296	0,0005

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0005	0,0792	0,0022
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0024	0,1289	0,0048
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0104	0,1665	0,0166
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0315	0,1951	0,0318
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0448	0,2178	0,0459
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	313,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0527	0,2522	0,0578
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0002	0,0078	0,0002
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0002	0,0389	0,0009
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0065	0,1011	0,0023
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0031	0,1543	0,0056
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0131	0,1918	0,0219
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0386	0,2198	0,0405
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0527	0,2417	0,0538
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	318,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0633	0,2749	0,0677
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0002	0,0100	0,0004
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0003	0,0526	0,0015
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0009	0,1289	0,0035
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0041	0,1830	0,0116
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0164	0,2194	0,0214
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0468	0,2461	0,0486
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0607	0,2671	0,0639
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	323,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0751	0,2987	0,0801
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,0;1,0	0,7766	-1,7060	0,0003	0,0130	0,0009
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,1;0,9	0,7766	-1,5690	0,0004	0,0743	0,0029
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,2;0,8	0,7766	-1,4321	0,0011	0,1629	0,0090
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,3;0,7	0,7766	-1,2951	0,0053	0,2148	0,0170
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,4;0,6	0,7766	-1,1581	0,0205	0,2490	0,0378
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,5;0,5	0,7766	-1,0212	0,0565	0,2741	0,0613

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,6;0,4	0,7766	-0,8842	0,0691	0,2939	0,0761
Ácido Cinâmico ⁽⁸⁾	Metanol;Água	328,15	0,8;0,2	0,7766	-0,6103	0,0883	0,3237	0,0969
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0012	0,0010	0,0010
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0017	0,0013	0,0010
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0022	0,0015	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0025	0,0016	0,0018
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0028	0,0018	0,0021
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0031	0,0020	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0031	0,0023	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	283,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0033	0,0028	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0014	0,0013	0,0010
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0020	0,0016	0,0012
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0025	0,0019	0,0024
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0028	0,0021	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0032	0,0023	0,0026
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0034	0,0026	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0035	0,0029	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	288,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0037	0,0035	0,0036
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0016	0,0017	0,0011
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0024	0,0021	0,0013
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0028	0,0024	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0032	0,0027	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0036	0,0029	0,0028
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0038	0,0033	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0039	0,0037	0,0035
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	293,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3501	0,0041	0,0037	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0018	0,0022	0,0013
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0026	0,0027	0,0016

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0031	0,0031	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0037	0,0034	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0041	0,0037	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0043	0,0041	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0044	0,0046	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	298,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0045	0,0053	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0021	0,0013	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0030	0,0035	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0036	0,0039	0,0035
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0042	0,0043	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0046	0,0169	0,0079
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0049	0,0051	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0050	0,0056	0,0045
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	303,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0050	0,0064	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0025	0,0036	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0034	0,0043	0,0021
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0041	0,0049	0,0039
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0047	0,0053	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0052	0,0058	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0055	0,0062	0,0059
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0055	0,0069	0,0057
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	308,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0056	0,0078	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0028	0,0045	0,0021
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0038	0,0054	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0047	0,0061	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0053	0,0066	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0058	0,0071	0,0061
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0061	0,0076	0,0064

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	0,9;0,1	2,0453	-0,3054	0,0062	0,0083	0,0058
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	313,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0062	0,0093	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0032	0,0056	0,0025
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0043	0,0067	0,0028
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0052	0,0074	0,0047
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0059	0,0080	0,0059
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0065	0,0086	0,0069
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0067	0,0092	0,0074
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	0,9;0,1	-0,6337	0,0373	0,0068	0,0051	0,0061
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	318,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0068	0,0110	0,0057
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,1249	0,0037	0,0069	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,9312	0,0050	0,0081	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,7375	0,0060	0,0090	0,0055
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,5438	0,0066	0,0097	0,0068
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,3501	0,0072	0,0104	0,0077
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,1564	0,0074	0,0110	0,0081
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	0,9;0,1	0,7719	0,2310	0,0075	0,0231	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Etanol;Água	323,15	1,0;0,0	-0,6337	0,2310	0,0075	0,0130	0,0073
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0016	0,0010	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0023	0,0011	0,0016
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0029	0,0012	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0034	0,0013	0,0028
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0036	0,0014	0,0035
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,8;0,2	-0,6337	-1,1249	0,0037	0,0069	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0033	0,0018	0,0053
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	283,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0029	0,0022	0,0003
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0017	0,0013	0,0018
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0026	0,0015	0,0020

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0033	0,0016	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0039	0,0017	0,0035
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0042	0,0018	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0041	0,0020	0,0030
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0037	0,0022	0,0050
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	288,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0032	0,0027	0,0008
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0020	0,0017	0,0018
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0029	0,0019	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0037	0,0020	0,0033
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0044	0,0021	0,0041
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0047	0,0023	0,0041
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0046	0,0025	0,0039
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4913	0,0043	0,0028	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	293,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0036	0,0033	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0022	0,0022	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0032	0,0024	0,0024
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0043	0,0028	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0049	0,0027	0,0046
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0052	0,0029	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0052	0,0031	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0048	0,0035	0,0057
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	298,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,0054	0,0042	0,0018	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0026	0,0027	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0038	0,0031	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0048	0,0033	0,0045
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0056	0,0034	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0059	0,0036	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0059	0,0039	0,0044

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0054	0,0043	0,0060
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	303,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0047	0,0050	0,0024
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0029	0,0035	0,0026
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0042	0,0039	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0054	0,0041	0,0050
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0062	0,0043	0,0059
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0063	0,0045	0,0059
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0066	0,0048	0,0048
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0062	0,0053	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	308,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0053	0,0060	0,0030
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0034	0,0043	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,4;0,6	-1,9014	0,9528	0,0049	0,0048	0,0034
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0062	0,0051	0,0059
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0070	0,0053	0,0067
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0075	0,0055	0,0066
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0074	0,0058	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0068	0,0064	0,0068
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	313,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0060	0,0072	0,0041
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0039	0,0054	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0055	0,0059	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0069	0,0062	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0079	0,0065	0,0072
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0084	0,0067	0,0069
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0083	0,0071	0,0054
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0078	0,0077	0,0073
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	318,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0069	0,0085	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9772	0,0044	0,0066	0,0036
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,7342	0,0062	0,0073	0,0048

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4913	0,0077	0,0076	0,0073
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,2483	0,0088	0,0078	0,0079
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,0054	0,0093	0,0081	0,0084
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,8;0,2	-0,6337	0,2376	0,0093	0,0085	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	0,9;0,1	-0,6337	0,4805	0,0088	0,0091	0,0080
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Isopropanol;Água	323,15	1,0;0,0	-0,6337	0,7234	0,0077	0,0101	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,3;0,7	-0,2190	-0,3364	0,0001	0,0010	0,0000
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0002	0,0022	0,0011
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0004	0,0018	0,0014
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0008	0,0023	0,0011
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0011	0,0028	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0015	0,0034	0,0011
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0021	0,0042	0,0000
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	283,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0027	0,0053	0,0006
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0001	0,0013	0,0001
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0003	0,0018	0,0000
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0005	0,0024	0,0016
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0009	0,0030	0,0013
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0013	0,0036	0,0018
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0018	0,0044	0,0016
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0023	0,0053	0,0008
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	288,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0030	0,0066	0,0013
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0002	0,0017	0,0001
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0003	0,0024	0,0001
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0007	0,0031	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0001	0,0038	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0015	0,0046	0,0021
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	293,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0021	0,0055	0,0019

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	293,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0027	0,0066	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	293,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0034	0,0080	0,0021
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0002	0,0022	0,0003
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0004	0,0006	0,0004
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0008	0,0039	0,0020
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0013	0,0048	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0018	0,0057	0,0025
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0024	0,0068	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0030	0,0080	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	298,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0038	0,0097	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0003	0,0028	0,0004
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0005	0,0038	0,0005
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0010	0,0049	0,0024
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0015	0,0059	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0021	0,0070	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0027	0,0083	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0034	0,0097	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	303,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0042	0,0116	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0004	0,0035	0,0005
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0007	0,0048	0,0008
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0012	0,0061	0,0028
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0017	0,0073	0,0025
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0024	0,0086	0,0036
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0031	0,0100	0,0046
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0039	0,0117	0,0042
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	308,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0073	0,0137	0,0047
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	313,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0005	0,0044	0,0008
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol; Água	313,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0008	0,0060	0,0012

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0014	0,0075	0,0031
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0021	0,0089	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0028	0,0104	0,0043
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0036	0,0121	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0044	0,0139	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	313,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0053	0,0161	0,0060
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0006	0,0055	0,0010
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0010	0,0073	0,0016
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0017	0,0091	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0024	0,0108	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0033	0,0125	0,0053
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,6103	0,0041	0,0143	0,0061
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0050	0,0163	0,0061
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	318,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0059	0,0187	0,0069
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,3;0,7	-0,6337	-1,2951	0,0007	0,0067	0,0014
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,4;0,6	-0,6337	-1,1581	0,0012	0,0404	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,5;0,5	-0,6337	-1,0212	0,0020	0,0110	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,8842	0,0028	0,0129	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,7;0,3	-0,6337	-0,7473	0,0037	0,0149	0,0062
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,8;0,2	-0,6337	-0,3501	0,0046	0,0169	0,0079
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	0,9;0,1	-0,6337	-0,4733	0,0065	0,0191	0,0073
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	Metanol;Água	323,15	1,0;0,0	-0,6337	-0,3364	0,0065	0,0216	0,0080
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,7473	0,0013	0,0036	0,0018
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,4;0,6	1,5134	-1,3054	0,0018	0,0010	0,0020
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0023	0,0010	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0027	0,0010	0,0030
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0029	0,0010	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0028	0,0010	0,0049

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0026	0,0011	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	283,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0023	0,0012	0,0000
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0015	0,0012	0,0014
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0021	0,0012	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0026	0,0013	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0030	0,0017	0,0040
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0032	0,0013	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0032	0,0013	0,0043
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0030	0,0014	0,0030
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	288,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0026	0,0015	0,0000
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0017	0,0015	0,0017
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0024	0,0016	0,0023
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0030	0,0016	0,0034
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0034	0,0016	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0036	0,0016	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0036	0,0017	0,0052
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0033	0,0018	0,0033
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	293,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0030	0,0019	0,0015
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0019	0,0019	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6103	0,0027	0,0083	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0034	0,0021	0,0039
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0040	0,0021	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0042	0,0021	0,0043
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0041	0,0021	0,0049
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0037	0,0022	0,0032
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	298,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0033	0,0024	0,0025
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0023	0,0025	0,0019
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0032	0,0027	0,0029

(Continuação)

Base de dados				Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0040	0,0027	0,0046
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0045	0,0027	0,0055
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0047	0,0026	0,0044
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0046	0,0027	0,0053
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0042	0,0028	0,0033
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	303,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0037	0,0030	0,0022
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0026	0,0031	0,0024
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0036	0,0033	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0045	0,0034	0,0050
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0052	0,0033	0,0062
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0054	0,0033	0,0051
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,8;0,2	0,7766	-1,5123	0,0052	0,1118	0,0037
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0048	0,0034	0,0036
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	308,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0042	0,0036	0,0035
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0030	0,0039	0,0027
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0041	0,0042	0,0038
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0051	0,0042	0,0060
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0058	0,0042	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0597	0,0060	0,0041	0,0054
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0058	0,0041	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0053	0,0042	0,0046
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	313,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0047	0,0044	0,0043
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0035	0,0049	0,0029
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0048	0,0052	0,0042
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0058	0,0052	0,0066
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0066	0,0051	0,0076
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,7;0,3	-0,6337	0,0373	0,0068	0,0051	0,0061
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0066	0,0050	0,0062

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0060	0,0051	0,0045
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	318,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0053	0,0053	0,0050
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,3;0,7	-0,6337	-0,9493	0,0040	0,0061	0,0034
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,4;0,6	-0,6337	-0,6970	0,0054	0,0064	0,0047
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,5;0,5	-0,6337	-0,4448	0,0066	0,0064	0,0074
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,6;0,4	-0,6337	-0,1925	0,0073	0,0063	0,0080
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,7;0,3	1,4824	3,8002	0,0076	0,0062	0,0064
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,8;0,2	-0,6337	0,3119	0,0073	0,0061	0,0068
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	0,9;0,1	-0,6337	0,5642	0,0067	0,0062	0,0046
Ácido Isoftálico ⁽¹²⁾	N-Propanol;Água	323,15	1,0;0,0	-0,6337	0,8164	0,0060	0,0064	0,0059
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	283,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0018	0,0124	0,0044
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	293,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0028	0,0844	0,0027
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	303,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0042	0,0249	0,0082
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	313,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0061	0,0340	0,0102
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	323,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0089	0,0453	0,0142
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	333,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0125	0,0593	0,0177
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	2-Propanol	343,15	Puro	-0,4376	0,7234	0,0172	0,0760	0,0190
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0003	0,0065	0,0022
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0005	0,0095	0,0051
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0009	0,0135	0,0056
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	313,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0015	0,0189	0,0081
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	323,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0025	0,0258	0,0090
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	333,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0040	0,0347	0,0124
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetato de Etila	343,15	Puro	-0,4376	0,7710	0,0060	0,0458	0,0149
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	283,15	Puro	-0,4376	0,1197	0,0006	0,0126	0,0105
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	293,15	Puro	1,5134	-1,1609	0,0010	0,0178	0,0113
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	303,15	Puro	-0,4376	0,1197	0,0017	0,0247	0,0149
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	313,15	Puro	-0,4376	0,1197	0,0026	0,0333	0,0176

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Acetona	323,15	Puro	-0,4376	0,1197	0,0041	0,0440	0,0211
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	283,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0017	0,0013	0,0024
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	293,15	Puro	1,5134	-0,9283	0,0022	0,0021	0,0023
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	303,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0028	0,0032	0,0023
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	313,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0036	0,0049	0,0028
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	323,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0046	0,0074	0,0035
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	333,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0058	0,0110	0,0045
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	343,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0070	0,0162	0,0061
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	353,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0087	0,0237	0,0086
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Água	363,15	Puro	1,6979	0,2310	0,0107	0,0346	0,0141
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	283,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,0437	0,1094	0,0486
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	293,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,0576	0,1281	0,0602
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	303,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,0722	0,1478	0,0716
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	313,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,0889	0,1686	0,0876
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	323,15	Puro	-1,1499	-0,3054	0,1067	0,1904	0,1059
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	333,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,1274	0,2132	0,1270
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Dimetilsulfóxido	343,15	Puro	-0,4376	-1,7984	0,1502	0,2370	0,1503
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	283,15	Puro	-0,4376	0,2310	0,0020	0,0143	0,0047
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	293,15	Puro	-0,4376	0,2310	0,0031	0,0205	0,0059
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	303,15	Puro	-0,4376	0,2310	0,0047	0,0286	0,0079
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	313,15	Puro	1,5134	-0,9903	0,0068	0,0389	0,0095
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	323,15	Puro	-0,4376	0,2310	0,0098	0,0516	0,0168
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	333,15	Puro	2,0453	1,2732	0,0136	0,0336	0,0092
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Etanol	343,15	Puro	-0,4376	0,2310	0,0188	0,0854	0,0307
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	283,15	Puro	-0,4376	-0,3364	0,0024	0,0204	0,0013
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	293,15	Puro	0,2707	-0,3054	0,0038	0,0286	0,0041
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	303,15	Puro	-0,4376	-0,3364	0,0059	0,0389	0,0077
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	313,15	Puro	-0,4376	-0,3364	0,0089	0,0514	0,0109

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	Metanol	323,15	Puro	-0,4376	-0,3364	0,0130	0,0663	0,0175
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	283,15	Puro	1,5134	-1,3054	0,0014	0,0074	0,0007
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	293,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0023	0,0109	0,0045
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	303,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0035	0,0156	0,0064
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	313,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0055	0,0219	0,0097
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	323,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0086	0,0301	0,0109
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	333,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0123	0,0405	0,0148
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	343,15	Puro	-0,4376	1,3176	0,0178	0,0535	0,0173
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Butanol	353,15	Puro	0,2707	2,7532	0,0253	0,0693	0,0159
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	283,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0018	0,0011	0,0017
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	293,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0029	0,0132	0,0049
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	303,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0044	0,0188	0,0065
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	313,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0064	0,0262	0,0082
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	323,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0092	0,0357	0,0077
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	333,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0131	0,0475	0,0118
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	343,15	Puro	-0,4376	0,8164	0,0186	0,0622	0,0094
Ácido Nicotínico ⁽¹⁴⁾	N-Propanol	278,15	Puro	1,4517	0,2310	0,0315	0,0259	0,0496
Artemisinina ⁽⁴⁾	Etanol	283,15	Puro	1,4517	0,2310	0,0383	0,0314	0,0402
Artemisinina ⁽⁴⁾	Etanol	293,15	Puro	1,4517	0,2310	0,0544	0,0451	0,0428
Artemisinina ⁽⁴⁾	Etanol	303,15	Puro	1,4517	0,2310	0,0834	0,0628	0,0467
Artemisinina ⁽⁴⁾	Etanol	313,15	Puro	1,4517	0,2310	0,1269	0,0853	0,0365
Artemisinina ⁽⁴⁾	N-Heptano	278,15	Puro	1,4517	5,0253	0,0388	0,0028	0,0552
Artemisinina ⁽⁴⁾	N-Heptano	283,15	Puro	1,4517	5,0253	0,0492	0,0585	0,0498
Artemisinina ⁽⁴⁾	N-Heptano	293,15	Puro	1,4517	5,0253	0,0700	0,0059	0,0894
Artemisinina ⁽⁴⁾	N-Heptano	303,15	Puro	0,2707	-0,4059	0,1109	0,0094	0,1008
Artemisinina ⁽⁴⁾	N-Heptano	313,15	Puro	1,4517	5,0253	0,1702	0,0146	0,0866
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	278,15	Puro	1,4517	2,7532	0,0452	0,0539	0,0435
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	283,15	Puro	1,4517	0,2310	0,0544	0,0451	0,0428

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	293,15	Puro	1,4517	2,7532	0,0634	0,0838	0,0661
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	303,15	Puro	1,4517	2,7532	0,0815	0,1094	0,0847
Artemisinina ⁽⁴⁾	Tolueno	313,15	Puro	1,4517	2,7532	0,1042	0,1399	0,1084
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	293,2	Puro	-0,2190	0,7234	0,0001	0,0000	0,0044
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	298,2	Puro	-0,2190	0,7234	0,0001	0,0000	0,0019
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	303,2	Puro	-0,2190	0,7234	0,0001	0,0000	0,0047
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	308,2	Puro	-0,2190	0,7234	0,0001	0,0000	0,0049
Baclofeno ⁽⁵⁾	2-Propanol	313,2	Puro	-0,2190	0,7234	0,0001	0,0001	0,0051
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	293,2	Puro	-0,2190	0,2310	0,0000	0,0000	0,0068
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	298,2	Puro	-0,2190	0,2310	0,0000	0,0142	0,0000
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	303,2	Puro	-0,2190	0,2310	0,0000	0,0000	0,0061
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	308,2	Puro	-0,2190	0,2310	0,0001	0,0001	0,0046
Baclofeno ⁽⁵⁾	Etanol	313,2	Puro	-0,2190	0,2310	0,0001	0,0001	0,0043
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	293,2	Puro	-0,2190	-0,3364	0,0001	0,0010	0,0000
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	298,2	Puro	-0,2190	-0,3364	0,0001	0,0001	0,0007
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	303,2	Puro	-0,2190	-0,3364	0,0001	0,0001	0,0014
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	308,2	Puro	-0,2190	-0,3364	0,0001	0,0002	0,0019
Baclofeno ⁽⁵⁾	Metanol	313,2	Puro	-0,2190	-0,3364	0,0002	0,0003	0,0026
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	293,2	Puro	-0,2190	0,8164	0,0001	0,0000	0,0039
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	298,2	Puro	-0,2190	0,8164	0,0001	0,0000	0,0029
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	303,2	Puro	-0,2190	0,8164	0,0001	0,0000	0,0029
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	308,2	Puro	-0,2190	0,8164	0,0001	0,0000	0,0040
Baclofeno ⁽⁵⁾	N-Propanol	313,2	Puro	-0,2190	0,8164	0,0001	0,0001	0,0052
Cafeína ⁽⁶⁾	Água	298,15	Puro	-1,1447	-1,7060	0,0022	0,0113	0,0082
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água	298,15	Puro	0,7719	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água	303,15	Puro	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água	308,15	Puro	0,7719	-1,7060	0,0000	0,0002	0,0000
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água	313,15	Puro	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0002	0,0000

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,9584;0,0416	0,7719	-1,6254	0,0000	0,0031	0,0000
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,9109;0,0891	0,7719	-1,5334	0,0001	0,0009	0,0004
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,8565;0,1435	0,7719	-1,4280	0,0003	0,0021	0,0005
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,7932;0,2068	0,7719	-1,3054	0,0008	0,0042	0,0009
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,7189;0,2811	0,7719	-1,1615	0,0015	0,0071	0,0005
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,6303;0,3697	0,7719	-0,9899	0,0030	0,0106	0,0016
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,5229;0,4771	0,7719	-0,7819	0,0042	0,0141	0,0031
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,39;0,61	0,7719	-0,5244	0,0065	0,0165	0,0098
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	298,15	0,2213;0,7787	0,7719	-0,1977	0,0068	0,0170	0,0214
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,9584;0,0416	0,7719	-1,6254	0,0000	0,0004	0,0000
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,9109;0,0891	0,7719	-1,5334	0,0001	0,0012	0,0001
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,8565;0,1435	0,7719	-1,4280	0,0004	0,0027	0,0006
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,7932;0,2068	0,7719	-1,3054	0,0009	0,0052	0,0010
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,7189;0,2811	0,7719	-1,1615	0,0018	0,0107	0,0047
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,6303;0,3697	0,7719	-0,9899	0,0034	0,0131	0,0032
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,5229;0,4771	0,7719	-0,7819	0,0051	0,0171	0,0048
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,39;0,61	0,7719	-0,5244	0,0074	0,0200	0,0094
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	303,15	0,2213;0,7787	0,7719	-0,1977	0,0076	0,0207	0,0170
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,9584;0,0416	-0,2190	0,2310	0,0000	0,0000	0,0061
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,9109;0,0891	0,7719	-1,5334	0,0001	0,0015	0,0000
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,8565;0,1435	0,7719	-1,4280	0,0005	0,0030	0,0002
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,7932;0,2068	0,7719	-1,3054	0,0011	0,0065	0,0015
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,7189;0,2811	0,7719	-1,1615	0,0023	0,0109	0,0024
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,6303;0,3697	0,7719	-0,9899	0,0042	0,0159	0,0044
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,5229;0,4771	0,7719	-0,7819	0,0056	0,0207	0,0057
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,39;0,61	0,7719	-0,5244	0,0083	0,0241	0,0072
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	308,15	0,2213;0,7787	0,7719	-0,1977	0,0084	0,0250	0,0071
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,9584;0,0416	0,7719	-1,6254	0,0001	0,0007	0,0000

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,9109;0,0891	0,7719	-1,5334	0,0002	0,0019	0,0004
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,8565;0,1435	0,7719	-1,4280	0,0005	0,0042	0,0010
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,7932;0,2068	0,7719	-1,3054	0,0013	0,0081	0,0022
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,7189;0,2811	0,7719	-1,1615	0,0028	0,0133	0,0034
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,6303;0,3697	0,7719	-0,9899	0,0048	0,0193	0,0058
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,5229;0,4771	0,7719	-0,7819	0,0066	0,0248	0,0074
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,39;0,61	0,7719	-0,5244	0,0089	0,0288	0,0058
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Água;Etanol	313,15	0,2213;0,7787	0,7719	-0,1977	0,0091	0,0300	0,0030
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Etanol	298,15	Puro	0,7719	0,2310	0,0063	0,0156	0,0111
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Etanol	303,15	Puro	0,7719	0,2310	0,0072	0,0190	0,0069
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Etanol	308,15	Puro	0,7719	0,2310	0,0075	0,0231	0,0037
Carbamazepina ⁽⁷⁾	Etanol	313,15	Puro	0,7719	0,2310	0,0078	0,0279	0,0003
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	298,15	Puro	0,7188	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	303,15	Puro	0,7188	-1,7060	0,0000	0,0002	0,0000
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	308,15	Puro	0,7188	-1,7060	0,0000	0,0002	0,0000
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	313,15	Puro	0,7188	-1,7060	0,0000	0,0003	0,0000
Curcumina ⁽⁹⁾	Água	318,15	Puro	0,7188	-1,7060	0,0000	0,0002	0,0000
Curcumina ⁽⁹⁾	Etanol	298,15	Puro	0,7766	-1,5690	0,0001	0,0296	0,0005
Frutose ⁽¹¹⁾	Água	293,2	Puro	-4,4253	-1,7060	0,2694	0,1525	0,2751
Frutose ⁽¹¹⁾	Água	303,2	Puro	-4,4253	-1,7060	0,3196	0,1956	0,3065
Frutose ⁽¹¹⁾	Água	313,2	Puro	-4,4253	-1,7060	0,3453	0,2485	0,3518
Frutose ⁽¹¹⁾	Água	323,2	Puro	-4,4253	-1,7060	0,3922	0,3137	0,4005
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol	303,2	Puro	1,1274	-0,3364	0,0326	0,1660	0,0322
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol	313,2	Puro	-4,4253	-0,3364	0,0540	0,2213	0,0572
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	1,0;0,0	-4,4253	-0,3364	0,0200	0,1217	0,0145
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,8352;0,1648	-4,4253	-0,5621	0,0487	0,1383	0,0409
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,6922;0,3078	-4,4253	-0,7579	0,0949	0,1512	0,1036
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,5677;0,4323	-4,4253	-0,9285	0,1494	0,1603	0,1637

(Continuação)

Base de dados						Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,3599;0,6401	-4,4253	-1,2131	0,2040	0,1690	0,2174	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,2725;0,7275	-4,4253	-1,3328	0,2351	0,1695	0,2410	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,1941;0,8059	-4,4253	-1,4402	0,2524	0,1680	0,2564	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,1232;0,8768	-4,4253	-1,5373	0,2660	0,1646	0,2630	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,0588;0,9412	-4,4253	-1,6255	0,2689	0,1595	0,2704	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	0,0;1,0	-4,4253	-1,7060	0,2694	0,1525	0,2751	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	294,2	0,4575;0,5425	-4,4253	-1,0794	0,1908	0,1701	0,2013	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	1,0;0,0	1,1274	-0,3364	0,0326	0,1660	0,0322	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,8352;0,1648	-4,4253	-0,5621	0,0757	0,1837	0,0816	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,6922;0,3078	-4,4253	-0,7579	0,1383	0,1966	0,1440	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,5677;0,4323	-4,4253	-0,9285	0,2060	0,2052	0,2039	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,4575;0,5425	-4,4253	-1,0794	0,2428	0,2104	0,2329	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,3599;0,6401	-4,4253	-1,2131	0,2586	0,2128	0,2555	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,2725;0,7275	-4,4253	-1,3328	0,2762	0,2130	0,2740	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,1941;0,8059	-4,4253	-1,4402	0,2841	0,2111	0,2904	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,1232;0,8768	-4,4253	-1,5373	0,3034	0,2076	0,2976	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,0588;0,9412	-4,4253	-1,6255	0,2998	0,2024	0,3050	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	303,2	0,0;1,0	-4,4253	-1,7060	0,3196	0,1956	0,3065	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	1,0;0,0	-4,4253	-0,3364	0,0540	0,2213	0,0572	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,8352;0,1648	-4,4253	-0,5621	0,1258	0,2390	0,1283	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,6922;0,3078	-4,4253	-0,7579	0,1963	0,2512	0,1880	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,5677;0,4323	-4,4253	-0,9285	0,2498	0,2591	0,2516	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,4575;0,5425	-4,4253	-1,0794	0,2860	0,2636	0,2879	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,3599;0,6401	-4,4253	-1,2131	0,3117	0,2655	0,3015	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,2725;0,7275	-4,4253	-1,3328	0,3219	0,2653	0,3191	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,1941;0,8059	-4,4253	-1,4402	0,3310	0,2633	0,3312	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,1232;0,8768	-4,4253	-1,5373	0,3372	0,2598	0,3358	
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,0588;0,9412	-4,4253	-1,6255	0,3391	0,2548	0,3413	

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,0;1,0	-4,4253	-1,7060	0,3453	0,2485	0,3518
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	1,0;0,0	-4,4253	-0,3364	0,1021	0,2900	0,0977
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,8352;0,1648	-4,4253	-0,5621	0,1999	0,3066	0,1845
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,6922;0,3078	-4,4253	-1,4402	0,2524	0,1680	0,2564
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,5677;0,4323	-4,4253	-0,9285	0,3083	0,3243	0,3103
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,4575;0,5425	-4,4253	-1,0794	0,3344	0,3280	0,3437
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,3599;0,6401	-4,4253	-1,2131	0,3528	0,3294	0,3609
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,2725;0,7275	-4,4253	-1,3328	0,3721	0,3289	0,3709
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,1941;0,8059	-4,4253	-1,4402	0,3763	0,3269	0,3819
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,1232;0,8768	-4,4253	-1,5373	0,3867	0,3236	0,3777
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,0588;0,9412	-4,4253	-1,6255	0,3903	0,3192	0,3815
Frutose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,0;1,0	-4,4253	-1,7060	0,3922	0,3137	0,4005
Lidocaína ⁽⁶⁾	Água	298,15	Puro	2,7508	-1,7060	0,0002	0,0001	0,0649
Naproxeno ⁽¹³⁾	Água	298,15	Puro	1,1274	-1,7060	0,0000	0,0000	0,0004
Naproxeno ⁽¹³⁾	Água	303,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Naproxeno ⁽¹³⁾	Água	308,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Naproxeno ⁽¹³⁾	Água	313,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	1,0;0,0	-0,6337	-0,1925	0,0030	0,0017	0,0040
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,87;0,13	1,6979	-1,3550	0,0045	0,0028	0,0051
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,748;0,252	1,6979	-1,1326	0,0065	0,0045	0,0055
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,634;0,366	1,6979	-0,9248	0,0086	0,0691	0,0090
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,527;0,473	1,6979	0,2310	0,0107	0,0346	0,0141
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,426;0,574	1,6979	0,0924	0,0120	0,0148	0,0187
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,331;0,669	1,6979	-0,3724	0,0124	0,0448	0,0090
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,241;0,759	1,6979	-0,2083	0,0123	0,0271	0,0142
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,157;0,843	1,5134	-0,5252	0,0117	0,0347	0,0162
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,076;0,924	1,6979	0,0924	0,0110	0,0432	0,0036
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	293,2	0,0;1,0	1,6979	0,2310	0,0107	0,0346	0,0141

(Continuação)

Solutos	Base de dados				Resultados			
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	1,0;0,0	1,6979	-1,5919	0,0037	0,0021	0,0041
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,87;0,13	1,6979	-1,3550	0,0052	0,0036	0,0056
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,748;0,252	1,6979	-1,1326	0,0074	0,0046	0,0079
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,634;0,366	-1,1499	1,8469	0,0096	0,0089	0,0092
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,527;0,473	1,6979	-0,7297	0,0118	0,0132	0,0100
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,426;0,574	1,6979	-0,5456	0,0135	0,0187	0,0175
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,331;0,669	1,6979	-0,0552	0,0140	0,0256	0,0185
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,241;0,759	2,0453	1,2732	0,0136	0,0336	0,0092
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,157;0,843	1,6979	-0,0552	0,0127	0,0424	0,0133
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,076;0,924	1,6979	0,0924	0,0120	0,0148	0,0187
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	298,2	0,0;1,0	1,5134	-0,5252	0,0117	0,0347	0,0162
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	1,0;0,0	1,6979	-1,5919	0,0044	0,0166	0,0045
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,87;0,13	1,6979	-1,3550	0,0060	0,0046	0,0061
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,748;0,252	1,6979	-1,1326	0,0083	0,0074	0,0077
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,634;0,366	0,2707	0,7710	0,0106	0,0081	0,0073
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,527;0,473	1,6979	0,0924	0,0130	0,0621	0,0137
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,426;0,574	1,6979	-0,5456	0,0150	0,0235	0,0203
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,331;0,669	1,6979	-0,3724	0,0157	0,0317	0,0123
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,241;0,759	1,6979	-0,2083	0,0149	0,0412	0,0072
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,157;0,843	1,6979	-0,0552	0,0140	0,0256	0,0185
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,076;0,924	1,6979	0,0924	0,0130	0,0621	0,0137
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	303,2	0,0;1,0	1,6979	0,2310	0,0129	0,0729	0,0250
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	1,0;0,0	1,6979	-1,5919	0,0050	0,0035	0,0041
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,87;0,13	1,6979	-1,3550	0,0067	0,0058	0,0070
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,748;0,252	1,5134	-0,5622	0,0090	0,0103	0,0063
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,634;0,366	1,6979	-0,9248	0,0115	0,0143	0,0122
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,527;0,473	1,6979	0,0924	0,0141	0,0209	0,0135
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,426;0,574	1,6979	-0,5456	0,0166	0,0458	0,0250

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,331;0,669	1,6979	-0,3724	0,0174	0,0391	0,0112
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,241;0,759	1,6979	-0,2083	0,0163	0,0500	0,0073
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,157;0,843	1,6979	-0,0552	0,0151	0,0615	0,0174
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,076;0,924	1,6979	0,0924	0,0141	0,0209	0,0135
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	308,2	0,0;1,0	1,6979	0,2310	0,0139	0,0849	0,0377
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	1,0;0,0	-1,1499	0,2310	0,0056	0,0044	0,0042
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,87;0,13	1,6979	-1,3550	0,0074	0,0074	0,0078
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,748;0,252	1,6979	-1,1326	0,0098	0,0064	0,0092
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,634;0,366	1,6979	-0,9248	0,0126	0,0179	0,0150
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,527;0,473	1,6979	-0,7297	0,0156	0,0261	0,0161
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,426;0,574	1,6979	-0,5456	0,0180	0,0361	0,0250
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,331;0,669	1,6979	-0,3724	0,0189	0,0477	0,0133
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,241;0,759	1,6979	-0,2083	0,0176	0,0602	0,0074
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,157;0,843	1,6979	-0,0552	0,0164	0,0729	0,0260
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,076;0,924	1,6979	0,0924	0,0152	0,0408	0,0153
Naproxeno ⁽¹³⁾	Etilenoglicol;Etanol	313,2	0,0;1,0	-1,1499	0,8455	0,0153	0,0981	0,0486
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0102	0,0077	0,0064
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	288,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0118	0,0101	0,0074
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0133	0,0217	0,0079
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	298,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0151	0,0167	0,0088
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0170	0,0211	0,0106
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	308,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0190	0,0263	0,0110
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	313,15	Puro	1,1274	0,2310	0,0215	0,0324	0,0115
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	318,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0244	0,0395	0,0125
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Etila	323,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0281	0,0476	0,0142
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	283,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0068	0,0247	0,0012
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	288,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0076	0,0059	0,0057
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	293,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0083	0,0077	0,0062

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	$\log K_{ow,soluto}$	$WALK_{mix}$	X_{exp}	X_{cosmo}	X_{GPR}
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	298,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0093	0,0101	0,0074
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	303,15	Puro	0,2707	0,7234	0,0108	0,1170	0,0112
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	308,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0121	0,0165	0,0101
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	313,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0140	0,0209	0,0106
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	318,15	Puro	0,2707	0,8164	0,0155	0,0261	0,0119
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de Isopropila	323,15	Puro	-0,2216	1,2732	0,0178	0,0323	0,0123
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	283,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0072	0,0027	0,0078
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	288,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0080	0,0036	0,0081
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	293,15	Puro	1,5134	-0,7807	0,0087	0,0048	0,0084
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	298,15	Puro	1,6979	-1,1326	0,0098	0,0064	0,0092
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	303,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0113	0,0083	0,0109
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	308,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0125	0,0107	0,0121
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	313,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0142	0,0137	0,0142
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	318,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0164	0,0174	0,0184
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Acetato de N-Butila	323,15	Puro	-0,2216	1,9329	0,0187	0,0219	0,0222
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	283,15	Puro	-0,6337	-1,1249	0,0021	0,0013	0,0031
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	288,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0025	0,0019	0,0027
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	293,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0030	0,0027	0,0032
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	298,15	Puro	1,5134	-0,9903	0,0036	0,0037	0,0032
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	303,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0044	0,0052	0,0031
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	308,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0054	0,0070	0,0023
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	313,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0066	0,0094	0,0022
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	318,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0079	0,0125	0,0038
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Etanol	323,15	Puro	-0,2216	0,2310	0,0101	0,0164	0,0021
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	283,15	Puro	1,5134	-0,5622	0,0090	0,0103	0,0063
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	288,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0105	0,0134	0,0067
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	293,15	Puro	-1,9014	-0,3364	0,0116	0,0171	0,0078
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	298,15	Puro	-0,2216	0,7710	0,0133	0,0217	0,0079

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	303,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0153	0,0270	0,0084
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	308,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0175	0,0332	0,0108
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	313,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0207	0,0402	0,0103
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	318,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0241	0,0483	0,0113
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Etila	323,15	Puro	-0,2216	0,2066	0,0276	0,0573	0,0154
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	283,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0067	0,0141	0,0062
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	288,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0079	0,0180	0,0077
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	293,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0089	0,0226	0,0093
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	298,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0109	0,0279	0,0107
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	303,15	Puro	0,2707	-0,3364	0,0129	0,1664	0,0176
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	308,15	Puro	1,6979	0,0924	0,0152	0,0408	0,0153
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	313,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0185	0,0484	0,0183
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	318,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0219	0,0569	0,0219
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Formato de Metila	323,15	Puro	-0,2216	-0,4440	0,0263	0,0409	0,0270
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	283,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0018	0,0004	0,0000
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	288,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0022	0,0006	0,0000
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	293,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0027	0,0009	0,0014
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	298,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0033	0,0013	0,0026
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	303,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0041	0,0018	0,0040
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	308,15	Puro	-0,2216	1,3683	0,0050	0,0025	0,0053
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	313,15	Puro	-0,6337	-0,7342	0,0062	0,0073	0,0048
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	318,15	Puro	1,6979	-1,1326	0,0074	0,0046	0,0079
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isobutanol	323,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0092	0,0062	0,0090
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	283,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0017	0,0007	0,0030
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	288,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0021	0,0010	0,0023
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	293,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0026	0,0015	0,0035
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	298,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0033	0,0021	0,0034
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	303,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0040	0,0029	0,0037

(Continuação)

Soluto	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	308,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0049	0,0039	0,0051
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	313,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0059	0,0053	0,0034
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	318,15	Puro	-0,2216	0,7234	0,0075	0,0072	0,0039
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Isopropanol	323,15	Puro	2,0453	-0,3054	0,0092	0,0062	0,0090
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	283,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0010	0,0041	0,0021
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	288,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0015	0,0056	0,0025
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	293,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0019	0,0076	0,0035
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	298,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0025	0,0100	0,0035
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	303,15	Puro	-0,6337	0,4805	0,0033	0,0018	0,0053
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	308,15	Puro	1,6979	-1,5919	0,0044	0,0166	0,0045
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	313,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0057	0,0208	0,0044
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	318,15	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0072	0,0257	0,0055
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Metanol	323,15	Puro	-0,0031	3,8002	0,0090	0,0311	0,0119
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	283,15	Puro	1,5134	-1,3054	0,0022	0,0004	0,0023
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	288,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0027	0,0005	0,0037
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	293,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0031	0,0008	0,0042
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	298,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0038	0,0011	0,0059
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	303,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0048	0,0015	0,0069
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	308,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0060	0,0021	0,0086
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	313,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0071	0,0029	0,0103
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	318,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0090	0,0039	0,0109
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Butanol	323,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0107	0,0053	0,0123
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	283,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0021	0,0006	0,0046
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	288,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0026	0,0008	0,0041
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	293,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0031	0,0012	0,0045
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	298,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0038	0,0017	0,0056
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	303,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0047	0,0024	0,0056
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	308,15	Puro	-0,4376	-1,7060	0,0058	0,0110	0,0045

(Continuação)

Soluto	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	313,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0073	0,0045	0,0070
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	318,15	Puro	-0,2216	0,8164	0,0088	0,0410	0,0118
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	N-Propanol	323,15	Puro	0,2707	0,7710	0,0106	0,0081	0,0073
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	283,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0022	0,0005	0,0016
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	288,15	Puro	-0,2216	1,3176	0,0027	0,0005	0,0037
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	293,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0033	0,0010	0,0037
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	298,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0041	0,0015	0,0048
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	303,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0051	0,0021	0,0052
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	308,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0066	0,0029	0,0070
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	313,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0083	0,0039	0,0082
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	318,15	Puro	1,1274	-0,3364	0,0104	0,0053	0,0081
Nifedipina ⁽¹⁵⁾	Sec-Butanol	323,15	Puro	-0,2216	1,4729	0,0129	0,0071	0,0093
Piroxicam ⁽¹⁶⁾	Água	303,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Piroxicam ⁽¹⁶⁾	Água	308,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Piroxicam ⁽¹⁶⁾	Água	313,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Piroxicam ⁽¹⁶⁾	Água	318,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0035	0,0312	0,0049
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0041	0,0291	0,0000
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0049	0,0274	0,0070
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0058	0,0259	0,0055
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,4;0,6	-0,2216	1,2732	0,0068	0,0247	0,0012
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0082	0,0235	0,0068
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0095	0,0225	0,0087
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,7;0,3	1,4824	5,0253	0,0116	0,0216	0,0099
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,8;0,2	-1,1499	0,2310	0,0135	0,0208	0,0120
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0162	0,0200	0,0137
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	278,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0194	0,0194	0,0178
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0047	0,0421	0,0013

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0056	0,0356	0,0045
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,2;0,8	0,7766	-1,3186	0,0066	0,0748	0,0039
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0079	0,0321	0,0082
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0093	0,0306	0,0137
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,5;0,5	1,5134	-0,9903	0,0108	0,0292	0,0096
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0128	0,0280	0,0126
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0154	0,0269	0,0149
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0176	0,0259	0,0176
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0216	0,0251	0,0199
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	283,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0251	0,0243	0,0271
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0064	0,0452	0,0079
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0077	0,0430	0,0080
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,2;0,8	-0,2216	0,8164	0,0088	0,0410	0,0118
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0106	0,0392	0,0125
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0123	0,0376	0,0150
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0144	0,0360	0,0148
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0173	0,0346	0,0170
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0201	0,0333	0,0203
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0238	0,0321	0,0238
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0277	0,0311	0,0276
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	288,15	1,0;0,0	2,1426	0,2310	0,0328	0,1160	0,0397
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,0;1,0	-1,1499	0,7234	0,0088	0,0537	0,0091
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0100	0,0516	0,0121
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0118	0,0496	0,0157
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0141	0,0476	0,0149
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,4;0,6	1,6979	-0,5456	0,0166	0,0458	0,0250
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0192	0,0440	0,0202
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0226	0,0424	0,0227

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,7;0,3	-0,2216	-0,4440	0,0263	0,0409	0,0270
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0310	0,0395	0,0310
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0358	0,0383	0,0363
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	293,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0418	0,0371	0,0449
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0114	0,0633	0,0134
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0134	0,0614	0,0162
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0156	0,0594	0,0204
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0181	0,0573	0,0184
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0212	0,0553	0,0307
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0250	0,0534	0,0260
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0289	0,0516	0,0295
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,7;0,3	2,1426	0,8701	0,0336	0,0499	0,0348
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0338	0,0483	0,0410
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0459	0,0468	0,0478
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	298,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0546	0,0454	0,0559
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0152	0,0742	0,0162
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0174	0,0725	0,0242
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,2;0,8	2,0453	1,8469	0,0205	0,0387	0,0193
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0237	0,0685	0,0193
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0277	0,0664	0,0362
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,5;0,5	2,0453	0,2310	0,0325	0,0643	0,0331
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0377	0,0623	0,0378
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0431	0,0604	0,0443
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0507	0,0585	0,0507
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0576	0,0568	0,0605
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	303,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0681	0,0552	0,0699
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0196	0,0865	0,0229
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0227	0,0851	0,0284

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0266	0,0833	0,0314
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0306	0,0813	0,0247
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0352	0,0792	0,0376
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0409	0,0770	0,0414
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0479	0,0748	0,0483
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0549	0,0726	0,0558
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0642	0,0705	0,0639
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0745	0,0686	0,0751
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	308,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,0868	0,0668	0,0867
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0257	0,0462	0,0250
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0294	0,0994	0,0393
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0336	0,0499	0,0348
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0394	0,0960	0,0255
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,4;0,6	2,1426	1,5091	0,0449	0,0938	0,0465
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0513	0,0915	0,0510
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0603	0,0891	0,0609
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0701	0,0868	0,0690
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0798	0,0845	0,0740
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,0919	0,0823	0,0929
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	313,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,1079	0,0802	0,1064
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,0;1,0	2,1426	0,2310	0,0328	0,1160	0,0397
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,1;0,9	2,1426	0,5505	0,0381	0,1155	0,0490
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,2;0,8	2,1426	0,8701	0,0434	0,1143	0,0435
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,3;0,7	2,1426	1,1896	0,0505	0,1126	0,0264
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,4;0,6	1,4824	1,3683	0,0584	0,1105	0,0464
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,5;0,5	2,1426	1,8287	0,0670	0,1081	0,0606
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,6;0,4	2,1426	2,1482	0,0751	0,1056	0,0759
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,7;0,3	2,1426	2,4678	0,0862	0,1031	0,0840

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,8;0,2	2,1426	2,7873	0,0979	0,1007	0,0900
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	0,9;0,1	2,1426	3,1069	0,1157	0,0982	0,1127
Progesterona ⁽¹⁷⁾	1-Octanol;Etanol	318,15	1,0;0,0	2,1426	3,4264	0,1324	0,0959	0,1262
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	298,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0067	0,0359	0,0022
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	298,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0044	0,0282	0,0067
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	298,15	0,51;0,49	0,7766	-1,3186	0,0033	0,0208	0,0020
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	298,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0018	0,0144	0,0022
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	298,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0008	0,0097	0,0023
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	303,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0008	0,0417	0,0063
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	303,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0055	0,0241	0,0079
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	303,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0037	0,0250	0,0027
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	303,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0021	0,0177	0,0024
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	303,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0011	0,0121	0,0021
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	308,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0009	0,0481	0,0087
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	308,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0068	0,0391	0,0079
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	308,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0045	0,0298	0,0033
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	308,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0026	0,0215	0,0026
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	308,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0012	0,0150	0,0018
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	313,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0112	0,0551	0,0096
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	313,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0077	0,0454	0,0088
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	313,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0053	0,0352	0,0045
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	313,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0030	0,0259	0,0034
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	313,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0015	0,0184	0,0015
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	318,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0138	0,0627	0,0121
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	318,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0091	0,0523	0,0094
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	318,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0062	0,0413	0,0054
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	318,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0034	0,0309	0,0034
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	318,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0019	0,0224	0,0018

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	323,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0156	0,0708	0,0155
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	323,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0108	0,0599	0,0112
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	323,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0076	0,0480	0,0071
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	323,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0043	0,0365	0,0040
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	323,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0026	0,0269	0,0016
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	328,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0186	0,0796	0,0196
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	328,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0125	0,0681	0,0129
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	328,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0089	0,0553	0,0085
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	328,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0053	0,0428	0,0049
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	328,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0028	0,0321	0,0019
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	333,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0217	0,0891	0,0239
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	333,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0150	0,0770	0,0138
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	333,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0106	0,0634	0,0101
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	333,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0006	0,0498	0,0070
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	333,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0033	0,0379	0,0022
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	338,15	0,8;0,2	-2,4060	-0,5855	0,0252	0,0992	0,0288
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	338,15	0,64;0,36	-2,4060	-0,8096	0,0177	0,0866	0,0158
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	338,15	0,51;0,49	-2,4060	-0,9917	0,0127	0,0722	0,0127
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	338,15	0,4;0,6	-2,4060	-1,1457	0,0072	0,0576	0,0071
RDX ⁽¹⁸⁾	Acetonitrila;Água	338,15	0,31;0,69	-2,4060	-1,2718	0,0039	0,0445	0,0025
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	298,15	0,72;0,28	-2,4060	-0,3218	0,0250	0,0160	0,0206
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	298,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0060	0,0061	0,0050
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	298,15	0,42;0,58	-2,4060	-0,8986	0,0013	0,0038	0,0019
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	298,15	0,3;0,7	-2,4060	-1,1293	0,0003	0,0163	0,0106
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	298,15	0,22;0,78	-2,4060	-1,2831	0,0002	0,0016	0,0016
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	303,15	0,72;0,28	-2,4060	-0,3218	0,0264	0,0195	0,0239
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	303,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0066	0,0077	0,0052
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	303,15	0,42;0,58	-2,4060	-0,8986	0,0015	0,0049	0,0027

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	303,15	0,3;0,7	0,7719	-1,4280	0,0005	0,0030	0,0002
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	303,15	0,22;0,78	-0,6337	-1,1581	0,0002	0,0022	0,0011
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	308,15	0,72;0,28	-2,4060	-0,3218	0,0287	0,0234	0,0297
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	308,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0075	0,0096	0,0062
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	308,15	0,42;0,58	-2,4060	-0,8986	0,0019	0,0062	0,0030
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	308,15	0,3;0,7	-2,4060	-1,1293	0,0006	0,0039	0,0001
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	308,15	0,22;0,78	-2,4060	-1,2831	0,0003	0,0028	0,0003
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	313,15	0,72;0,28	-2,4060	-0,3218	0,0315	0,0279	0,0327
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	313,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0087	0,0120	0,0067
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	313,15	0,42;0,58	0,7719	-1,1615	0,0023	0,0109	0,0024
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	313,15	0,3;0,7	-2,4060	-1,1293	0,0007	0,0051	0,0002
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	313,15	0,22;0,78	-2,4060	-1,2831	0,0004	0,0037	0,0000
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	318,15	0,72;0,28	-2,4060	-0,3218	0,0341	0,0329	0,0381
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	318,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0100	0,0148	0,0072
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	318,15	0,42;0,58	-2,4060	-0,8986	0,0029	0,0099	0,0034
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	318,15	0,3;0,7	-2,4060	-1,1293	0,0009	0,0064	0,0001
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	318,15	0,22;0,78	-2,4060	-1,2831	0,0005	0,0047	0,0000
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	323,15	0,53;0,47	-2,4060	-0,6871	0,0115	0,0181	0,0075
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	323,15	0,42;0,58	-2,4060	-0,8986	0,0035	0,0123	0,0041
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	323,15	0,3;0,7	-2,4060	-1,1293	0,0011	0,0081	0,0002
RDX ⁽¹⁸⁾	Ácido Nítrico;Água	323,15	0,22;0,78	-2,4060	-1,2831	0,0005	0,0060	0,0000
Sacarose ⁽¹¹⁾	Água	293,2	Puro	-5,7728	-1,7060	0,0942	0,0321	0,0939
Sacarose ⁽¹¹⁾	Água	303,2	Puro	-5,7728	-1,7060	0,1014	0,0422	0,1007
Sacarose ⁽¹¹⁾	Água	313,2	Puro	-5,7728	-1,7060	0,1076	0,0540	0,1091
Sacarose ⁽¹¹⁾	Água	323,2	Puro	-5,7728	-1,7060	0,1169	0,0678	0,1190
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol	303,2	Puro	-5,7728	-0,3364	0,0007	0,0458	0,0002
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol	313,2	Puro	-0,2216	-0,3364	0,0010	0,0041	0,0021
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	293,2	1,0;0,0	-5,7728	-0,3364	0,0006	0,0338	0,0000

(Continuação)

	Base de dados				Resultados				
	Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,8352;0,1648	-5,7728	-0,5621	0,0016	0,0382	0,0006
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,6922;0,3078	2,1426	0,2310	0,0047	0,0421	0,0013
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,5677;0,4323	1,6979	-0,3724	0,0124	0,0448	0,0090
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,4575;0,5425	2,1426	0,2310	0,0257	0,0462	0,0250
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,3599;0,6401	-5,7728	-1,2131	0,0411	0,0465	0,0394
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,2725;0,7275	-5,7728	-1,3328	0,0562	0,0456	0,0535
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,1941;0,8059	-5,7728	-1,4402	0,0673	0,0437	0,0690
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,1232;0,8768	-5,7728	-1,5373	0,0769	0,0408	0,0791
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,0588;0,9412	-5,7728	-1,6255	0,0897	0,0369	0,0870
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	293,2	0,0;1,0	-5,7728	-1,7060	0,0942	0,0321	0,0939
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	1,0;0,0	-5,7728	-0,3364	0,0007	0,0458	0,0002
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,8352;0,1648	-0,2216	0,8164	0,0021	0,0006	0,0046
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,6922;0,3078	-5,7728	-0,7579	0,0063	0,0547	0,0056
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,5677;0,4323	-5,7728	-0,9285	0,0165	0,0573	0,0166
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,4575;0,5425	-5,7728	-1,0794	0,0329	0,0586	0,0337
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,3599;0,6401	1,4517	5,0253	0,0492	0,0585	0,0498
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,2725;0,7275	-5,7728	-1,3328	0,0647	0,0573	0,0637
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,1941;0,8059	-5,7728	-1,4402	0,0759	0,0550	0,0774
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,1232;0,8768	-5,7728	-1,5373	0,0880	0,0517	0,0869
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,0588;0,9412	-5,7728	-1,6255	0,0943	0,0475	0,0943
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	303,2	0,0;1,0	-5,7728	-1,7060	0,1014	0,0422	0,1007
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	1,0;0,0	-0,2216	-0,3364	0,0010	0,0041	0,0021
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,8352;0,1648	-5,7728	-0,5621	0,0028	0,0652	0,0029
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,6922;0,3078	1,6979	-0,9248	0,0086	0,0691	0,0090
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,5677;0,4323	-5,7728	-0,9285	0,0224	0,0716	0,0236
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,4575;0,5425	-5,7728	-1,0794	0,0420	0,0725	0,0432
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,3599;0,6401	-5,7728	-1,2131	0,0599	0,0721	0,0605
Sacarose ⁽¹¹⁾		Metanol;Água	313,2	0,2725;0,7275	-5,7728	-1,3328	0,0740	0,0706	0,0750

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,1941;0,8059	-5,7728	-1,4402	0,0881	0,0680	0,0863
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,1232;0,8768	-5,7728	-1,5373	0,0969	0,0643	0,0960
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,0588;0,9412	-5,7728	-1,6255	0,1035	0,0597	0,1030
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	313,2	0,0;1,0	-5,7728	-1,7060	0,1076	0,0540	0,1091
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	1,0;0,0	-5,7728	-0,3364	0,0013	0,0759	0,0043
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,8352;0,1648	-5,7728	-0,5621	0,0039	0,0815	0,0058
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,6922;0,3078	-5,7728	-0,7579	0,0122	0,0854	0,0152
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,5677;0,4323	1,1274	1,3683	0,0308	0,0876	0,0318
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,4575;0,5425	-5,7728	-1,0794	0,0542	0,0883	0,0535
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,3599;0,6401	-5,7728	-1,2131	0,0730	0,0876	0,0723
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,2725;0,7275	-5,7728	-1,3328	0,0861	0,0857	0,0876
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,1941;0,8059	-5,7728	-1,4402	0,0983	0,0828	0,0979
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,1232;0,8768	-5,7728	-1,5373	0,1070	0,0788	0,1066
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,0588;0,9412	-5,7728	-1,6255	0,1129	0,0738	0,1129
Sacarose ⁽¹¹⁾	Metanol;Água	323,2	0,0;1,0	-5,7728	-1,7060	0,1169	0,0678	0,1190
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	278,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	283,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	288,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	293,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	298,15	Puro	0,0612	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	303,15	Puro	-3,0339	0,7710	0,0000	0,0000	0,0119
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	308,15	Puro	-3,0339	0,7710	0,0000	0,0313	0,0134
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	313,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0000	0,0001
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetato de Etila	318,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	278,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0832	0,0396	0,0716
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	283,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0857	0,0455	0,0756
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	288,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0884	0,0520	0,0799
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	293,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0912	0,0593	0,0842

(Continuação)

Soluto	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	298,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0942	0,0673	0,0886
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	303,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,0975	0,0762	0,0929
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	308,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,1008	0,0860	0,0971
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	313,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,1053	0,0968	0,1020
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona	318,15	Puro	-3,0339	0,1197	0,1104	0,1086	0,1039
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0001	0,0137	0,0086
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0021	0,0159	0,0147
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0054	0,0183	0,0152
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0093	0,0210	0,0103
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0174	0,0237	0,0177
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0281	0,0267	0,0259
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0408	0,0298	0,0388
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0514	0,0330	0,0499
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	278,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0640	0,0363	0,0630
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,1442;0,8558	-2,4060	-1,1293	0,0003	0,0163	0,0106
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0023	0,0188	0,0142
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0056	0,0216	0,0150
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0101	0,0246	0,0138
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0189	0,0277	0,0197
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,1925	0,0298	0,0311	0,0298
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0424	0,0345	0,0423
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0537	0,0381	0,0555
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	283,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0662	0,0418	0,0671
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0005	0,0192	0,0130
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0025	0,0221	0,0166
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0058	0,0253	0,0167
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0117	0,0287	0,0139
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0206	0,0323	0,0225

(Continuação)

Solutos	Base de dados			Resultados				
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow} , soluto	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0317	0,0361	0,0320
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0444	0,0399	0,0464
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0565	0,0439	0,0583
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	288,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0688	0,0480	0,0710
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0006	0,0226	0,0125
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0028	0,0260	0,0172
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0064	0,0296	0,0169
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0127	0,0334	0,0180
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0227	0,0375	0,0252
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0341	0,0417	0,0350
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0470	0,0460	0,0504
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0596	0,0504	0,0647
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	293,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0717	0,0549	0,0754
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0076	0,0264	0,0147
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0032	0,0303	0,0177
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0074	0,0345	0,0204
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0144	0,0388	0,0204
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0253	0,0434	0,0283
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0370	0,0480	0,0401
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0500	0,0528	0,0537
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0629	0,0577	0,0677
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	298,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0750	0,0625	0,0805
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0009	0,0309	0,0121
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,275;0,725	1,5134	-0,9903	0,0036	0,0037	0,0032
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0083	0,0400	0,0220
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0163	0,0449	0,0221
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0279	0,0500	0,0329
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0400	0,0552	0,0461

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log $K_{ow,soluto}$	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0530	0,0604	0,0591	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0665	0,0657	0,0747	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	303,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0787	0,0710	0,0863	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0012	0,0360	0,0110	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0038	0,0410	0,0187	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0093	0,0463	0,0211	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0183	0,0518	0,0241	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0306	0,0575	0,0367	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0430	0,0632	0,0495	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0562	0,0690	0,0633	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0702	0,0747	0,0798	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	308,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0826	0,0804	0,0911	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0015	0,0419	0,0156	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0042	0,0476	0,0175	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,394;0,606	-3,0339	0,5144	0,0104	0,0535	0,0238	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0203	0,0596	0,0287	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0355	0,0659	0,0421	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0463	0,0722	0,0540	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0597	0,0785	0,0712	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0741	0,0847	0,0848	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	313,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0867	0,0908	0,0947	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,1442;0,8558	-3,0339	0,6771	0,0017	0,0486	0,0155	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,275;0,725	-3,0339	0,5919	0,0045	0,0550	0,0182	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,394;0,606	0,2707	0,7710	0,0128	0,1062	0,0128	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,5028;0,4972	-3,0339	0,4435	0,0241	0,0685	0,0311	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,6027;0,3973	-3,0339	0,3784	0,0366	0,0753	0,0431	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,6947;0,3053	-3,0339	0,3185	0,0498	0,0822	0,0622	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,7797;0,2203	-3,0339	0,2632	0,0634	0,0891	0,0770	

(Continuação)

Soluto	Base de dados				Resultados			
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow} , soluto	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,8585;0,1415	-3,0339	0,2118	0,0781	0,0958	0,0890
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Acetato de Etila	318,15	0,9318;0,0682	-3,0339	0,1641	0,0911	0,1023	0,0976
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0100	0,0020	0,0207
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0146	0,0033	0,0227
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0197	0,0051	0,0225
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0251	0,0078	0,0263
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0335	0,0114	0,0320
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0414	0,0161	0,0394
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0523	0,0218	0,0487
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0624	0,0282	0,0575
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	278,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0696	0,0347	0,0656
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0111	0,0026	0,0215
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0161	0,0042	0,0216
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0216	0,0064	0,0259
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0271	0,0096	0,0293
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0353	0,0138	0,0336
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0451	0,0193	0,0423
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0551	0,0259	0,0516
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0643	0,0331	0,0613
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	283,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0714	0,0402	0,0697
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0126	0,0033	0,0216
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0182	0,0052	0,0219
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0241	0,0080	0,0271
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0298	0,0311	0,0298
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0381	0,0168	0,0372
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0490	0,0231	0,0459
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0585	0,0306	0,0558
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona;Etanol	288,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0670	0,0386	0,0657

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	288,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0742	0,0464	0,0741
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0150	0,0042	0,0223
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0213	0,0066	0,0230
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0274	0,0099	0,0279
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0334	0,0144	0,0338
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0426	0,0203	0,0395
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0532	0,0276	0,0494
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0625	0,0360	0,0599
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0707	0,0449	0,0703
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	293,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0783	0,0533	0,0785
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0179	0,0054	0,0232
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0249	0,0082	0,0253
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0312	0,0122	0,0297
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0376	0,0175	0,0363
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0479	0,0244	0,0439
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0576	0,0327	0,0536
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0669	0,0421	0,0647
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0749	0,0519	0,0747
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	298,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0828	0,0610	0,0830
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0208	0,0067	0,0240
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0282	0,0102	0,0280
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0349	0,0149	0,0324
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0417	0,0213	0,0396
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0530	0,0293	0,0476
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0623	0,0387	0,0577
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0716	0,0492	0,0695
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0793	0,0598	0,0795
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	303,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0872	0,0695	0,0885

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0238	0,0085	0,0240
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0320	0,0126	0,0301
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0390	0,0183	0,0356
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0463	0,0257	0,0427
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0583	0,0350	0,0531
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0676	0,0456	0,0627
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0766	0,0572	0,0751
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0841	0,0688	0,0844
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	308,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0919	0,0790	0,0924
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0272	0,0106	0,0259
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0361	0,0156	0,0312
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0438	0,0224	0,0388
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0514	0,0311	0,0472
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0642	0,0416	0,0572
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0734	0,0536	0,0686
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0821	0,0663	0,0805
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0893	0,0787	0,0892
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	313,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,0968	0,0896	0,0962
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,081;0,919	-3,0339	0,2220	0,0306	0,0131	0,0291
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,1655;0,8345	-3,0339	0,2126	0,0408	0,0192	0,0345
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,2537;0,7463	-3,0339	0,2027	0,0487	0,0272	0,0427
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,3458;0,6542	-3,0339	0,1925	0,0568	0,0374	0,0520
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,4423;0,5577	-3,0339	0,1817	0,0704	0,0495	0,0629
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,5433;0,4567	-3,0339	0,1705	0,0795	0,0628	0,0739
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,6492;0,3508	-3,0339	0,1587	0,0881	0,0767	0,0851
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,7603;0,2397	-3,0339	0,1463	0,0949	0,0899	0,0945
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Etanol	318,15	0,8771;0,1229	-3,0339	0,1333	0,1021	0,1012	0,1009
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0148	0,0068	0,0151

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0191	0,0090	0,0189	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0249	0,0117	0,0236	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0288	0,0150	0,0292	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0382	0,0191	0,0358	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0472	0,0237	0,0448	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0563	0,0288	0,0552	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0646	0,0340	0,0664	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	278,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0726	0,0384	0,0728	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0172	0,0087	0,0183	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0212	0,0113	0,0224	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0269	0,0145	0,0270	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0326	0,0184	0,0329	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0407	0,0231	0,0401	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0489	0,0284	0,0495	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0593	0,0341	0,0589	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0668	0,0397	0,0701	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	283,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0749	0,0444	0,0773	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0203	0,0110	0,0215	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0244	0,0141	0,0260	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0298	0,0179	0,0311	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0369	0,0225	0,0368	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0442	0,0278	0,0444	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0520	0,0337	0,0528	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0627	0,0400	0,0639	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0696	0,0462	0,0738	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	288,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0777	0,0511	0,0812	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0245	0,0138	0,0252	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0275	0,0176	0,0301	

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0347	0,0220	0,0355	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0417	0,0273	0,0416	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0493	0,0333	0,0489	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0571	0,0400	0,0581	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0666	0,0468	0,0675	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0735	0,0534	0,0779	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	293,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0817	0,0586	0,0853	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0295	0,0173	0,0294	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0324	0,0217	0,0348	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0403	0,0270	0,0405	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0471	0,0330	0,0465	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0552	0,0398	0,0540	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0633	0,0471	0,0630	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0710	0,0545	0,0717	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0778	0,0615	0,0821	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	298,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0860	0,0668	0,0889	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0344	0,0216	0,0342	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0387	0,0268	0,0397	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0458	0,0328	0,0456	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0531	0,0397	0,0523	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0609	0,0472	0,0591	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0686	0,0552	0,0681	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0754	0,0632	0,0769	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0821	0,0706	0,0862	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	303,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0901	0,0760	0,0929	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0399	0,0269	0,0394	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0452	0,0329	0,0457	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0515	0,0398	0,0522	

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0599	0,0475	0,0581	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0665	0,0558	0,0653	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0737	0,0644	0,0733	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0819	0,0730	0,0811	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0866	0,0806	0,0897	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	308,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0943	0,0861	0,0973	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0460	0,0332	0,0458	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0532	0,0402	0,0522	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0584	0,0480	0,0588	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0675	0,0565	0,0652	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0725	0,0656	0,0716	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0792	0,0749	0,0788	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0854	0,0839	0,0860	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0917	0,0918	0,0940	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	313,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,0991	0,0973	0,1003	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,0578;0,9422	-3,0339	-0,3100	0,0528	0,0410	0,0530	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,1212;0,8788	-3,0339	-0,2811	0,0628	0,0489	0,0598	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,1912;0,8088	-3,0339	-0,2492	0,0658	0,0576	0,0664	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,2689;0,7311	-3,0339	-0,2137	0,0762	0,0670	0,0721	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,3555;0,6445	-3,0339	-0,1742	0,0786	0,0768	0,0788	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,4528;0,5472	-3,0339	-0,1299	0,0851	0,0867	0,0846	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,5628;0,4372	-3,0339	-0,0797	0,0912	0,0960	0,0906	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,6882;0,3118	-3,0339	-0,0225	0,0972	0,1041	0,0975	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Metanol	318,15	0,8324;0,1676	-3,0339	0,0432	0,1042	0,1095	0,1039	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0001	0,0002	0,0001	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0006	0,0004	0,0007	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0019	0,0010	0,0023	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0036	0,0021	0,0052	

(Continuação)

Base de dados						Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0100	0,0040	0,0092	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0142	0,0072	0,0101	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0312	0,0120	0,0068	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0433	0,0189	0,0246	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	278,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0560	0,0282	0,0361	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,1499;0,8501	0,7766	-1,4321	0,0001	0,0252	0,0002	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0008	0,0005	0,0009	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0024	0,0013	0,0029	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0051	0,0026	0,0059	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0108	0,0049	0,0104	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0151	0,0087	0,0120	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0322	0,0143	0,0107	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0450	0,0224	0,0265	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	283,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0587	0,0328	0,0379	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0002	0,0003	0,0002	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0011	0,0007	0,0012	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0031	0,0016	0,0035	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0066	0,0032	0,0066	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0119	0,0060	0,0124	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0163	0,0104	0,0151	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0336	0,0171	0,0090	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0477	0,0263	0,0301	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	288,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0621	0,0380	0,0423	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0002	0,0003	0,0002	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,284;0,716	1,5134	-1,1609	0,0014	0,0009	0,0014	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0040	0,0020	0,0042	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0080	0,0039	0,0079	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0134	0,0073	0,0134	

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0177	0,0125	0,0164	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0360	0,0202	0,0095	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0512	0,0307	0,0316	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	293,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0644	0,0440	0,0470	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0003	0,0004	0,0003	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,284;0,716	-0,4376	0,8164	0,0018	0,0011	0,0017	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0050	0,0024	0,0050	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0096	0,0048	0,0089	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0150	0,0088	0,0150	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0197	0,0149	0,0177	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0391	0,0239	0,0120	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0552	0,0359	0,0339	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	298,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0682	0,0506	0,0551	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,1499;0,8501	-0,6337	-1,1581	0,0004	0,0006	0,0004	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0022	0,0014	0,0021	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0061	0,0030	0,0060	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0112	0,0058	0,0105	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0166	0,0105	0,0170	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0218	0,0177	0,0198	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0422	0,0281	0,0117	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0591	0,0417	0,0372	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	303,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0716	0,0581	0,0571	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0006	0,0007	0,0006	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0027	0,0017	0,0026	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0072	0,0037	0,0069	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0128	0,0070	0,0120	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0183	0,0126	0,0188	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0240	0,0211	0,0212	

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0437	0,0330	0,0106	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0633	0,0484	0,0369	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	308,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0762	0,0665	0,0636	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0007	0,0009	0,0008	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0032	0,0021	0,0031	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0085	0,0045	0,0081	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0146	0,0085	0,0138	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0201	0,0151	0,0220	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,7041;0,2959	1,4824	5,0253	0,0260	0,1133	0,0286	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0487	0,0386	0,0104	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0675	0,0560	0,0394	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	313,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0814	0,0758	0,0670	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,1499;0,8501	-3,0339	2,3584	0,0008	0,0012	0,0011	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,284;0,716	-3,0339	2,0053	0,0038	0,0026	0,0038	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,4047;0,5953	-3,0339	1,6874	0,0098	0,0054	0,0095	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,514;0,486	-3,0339	1,3996	0,0164	0,0102	0,0158	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,6134;0,3866	-3,0339	1,1378	0,0221	0,0179	0,0248	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,7041;0,2959	-3,0339	0,8989	0,0281	0,0294	0,0230	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,7873;0,2127	-3,0339	0,6798	0,0523	0,0452	0,0079	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,8639;0,1361	-3,0339	0,4781	0,0725	0,0646	0,0414	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Acetona; Tolueno	318,15	0,9345;0,0655	-3,0339	0,2922	0,0872	0,0863	0,0720	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	278,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0055	0,0012	0,0209	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	283,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0066	0,0016	0,0203	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	288,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0079	0,0021	0,0188	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	293,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0095	0,0027	0,0209	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	298,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0115	0,0034	0,0198	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	303,15	Puro	1,5134	-0,5252	0,0139	0,0044	0,0222	
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	308,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0169	0,0055	0,0225	

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	313,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0205	0,0070	0,0243
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Etanol	318,15	Puro	-3,0339	0,2310	0,0249	0,0088	0,0242
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	278,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0112	0,0052	0,0113
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	283,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0136	0,0067	0,0143
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	288,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0165	0,0085	0,0173
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	293,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0199	0,0108	0,0206
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	298,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0238	0,0137	0,0244
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	303,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0286	0,0173	0,0284
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	308,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0343	0,0217	0,0337
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	313,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0408	0,0272	0,0389
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Metanol	318,15	Puro	-3,0339	-0,3364	0,0486	0,0339	0,0453
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	278,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0000	0,0001
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	283,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	288,15	Puro	1,6979	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	293,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0001	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	298,15	Puro	0,7719	-1,7060	0,0000	0,0001	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	303,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0002	0,0000
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	308,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0003	0,0001
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	313,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0003	0,0002
Sulfanilamida ⁽¹⁹⁾	Tolueno	318,15	Puro	-3,0339	2,7532	0,0000	0,0004	0,0003
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	298,15	Puro	-2,7452	-1,7060	0,0143	0,0246	0,0100
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	303,15	Puro	-2,7452	-1,7060	0,0168	0,0283	0,0118
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	308,15	Puro	-2,7452	-1,7060	0,0199	0,0324	0,0135
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	313,15	Puro	-2,7452	-1,7060	0,0231	0,0368	0,0159
Taurina ⁽²⁰⁾	Água	318,15	Puro	-2,7452	-1,7060	0,0269	0,0416	0,0181
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	298,15	0,9744;0,0256	-2,4060	-0,8096	0,0055	0,0241	0,0079
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	298,15	0,9441;0,0559	-2,7452	-1,6665	0,0030	0,0231	0,0046
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	298,15	0,9079;0,0921	-2,7452	-1,6409	0,0017	0,0216	0,0026

(Continuação)

Solutos	Base de dados				Resultados			
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow} soluto	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	298,15	0,8637;0,1363	-2,7452	-1,6096	0,0013	0,0197	0,0000
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	298,15	0,8086;0,1914	1,5134	-1,0793	0,0007	0,0174	0,0000
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	303,15	0,9744;0,0256	-2,7452	-1,6879	0,0068	0,0278	0,0092
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	303,15	0,9441;0,0559	-2,7452	-1,6665	0,0035	0,0267	0,0061
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	303,15	0,9079;0,0921	-2,7452	-1,6409	0,0019	0,0250	0,0033
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	303,15	0,8637;0,1363	-2,7452	-1,6096	0,0013	0,0229	0,0006
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	303,15	0,8086;0,1914	-2,7452	-1,3931	0,0009	0,0324	0,0003
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	308,15	0,9744;0,0256	-2,7452	-1,6879	0,0082	0,0318	0,0107
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	308,15	0,9441;0,0559	-2,7452	-1,6665	0,0044	0,0306	0,0077
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	308,15	0,9079;0,0921	-2,7452	-1,6409	0,0026	0,0289	0,0046
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	308,15	0,8637;0,1363	-2,7452	-1,6096	0,0016	0,0265	0,0017
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	308,15	0,8086;0,1914	-2,7452	-1,5707	0,0010	0,0237	0,0000
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	313,15	0,9744;0,0256	-2,7452	-1,6879	0,0092	0,0362	0,0127
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	313,15	0,9441;0,0559	-0,6337	0,8164	0,0053	0,0053	0,0050
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	313,15	0,9079;0,0921	-2,7452	-1,6409	0,0031	0,0331	0,0058
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	313,15	0,8637;0,1363	-2,7452	-1,6096	0,0019	0,0305	0,0026
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	313,15	0,8086;0,1914	-2,7452	-1,2788	0,0011	0,0354	0,0012
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	318,15	0,9744;0,0256	-2,7452	-1,6879	0,0114	0,0410	0,0158
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	318,15	0,9441;0,0559	-2,7452	-1,6665	0,0064	0,0397	0,0114
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	318,15	0,9079;0,0921	-2,7452	-1,6409	0,0040	0,0377	0,0077
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	318,15	0,8637;0,1363	-2,7452	-1,6096	0,0026	0,0350	0,0040
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;1,2-Propilenoglicol	318,15	0,8086;0,1914	-2,7452	-1,5707	0,0016	0,0315	0,0007
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	298,15	0,9667;0,0333	-2,7452	-1,6452	0,0059	0,0259	0,0055
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	298,15	0,928;0,072	-2,7452	-1,5746	0,0027	0,0262	0,0033
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	298,15	0,8827;0,1173	-2,7452	-1,4918	0,0014	0,0256	0,0019
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	298,15	0,8286;0,1714	-2,7452	-1,3931	0,0006	0,0241	0,0000
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	298,15	0,7633;0,2367	-2,7452	-1,2739	0,0003	0,0216	0,0000
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	303,15	0,9667;0,0333	-2,7452	-1,6452	0,0072	0,0298	0,0070

(Continuação)

Base de dados					Resultados				
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	XGPR	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	303,15	0,928;0,072	-2,7452	-1,5746	0,0032	0,0303	0,0041	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	303,15	0,8827;0,1173	-2,7452	-1,4918	0,0016	0,0297	0,0021	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	303,15	0,8286;0,1714	-2,7452	-1,3931	0,0007	0,0280	0,0001	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	303,15	0,7633;0,2367	-2,7452	-1,2739	0,0003	0,0253	0,0000	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	308,15	0,9667;0,0333	-2,7452	-1,6452	0,0087	0,0341	0,0079	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	308,15	0,928;0,072	-2,7452	-1,5746	0,0040	0,0347	0,0054	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	308,15	0,8827;0,1173	-2,7452	-1,4918	0,0019	0,0342	0,0031	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	308,15	0,8286;0,1714	-2,7452	-1,3931	0,0009	0,0324	0,0003	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	308,15	0,7633;0,2367	-2,7452	-1,2739	0,0004	0,0295	0,0000	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	313,15	0,9667;0,0333	-2,7452	-1,6452	0,0105	0,0387	0,0103	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	313,15	0,928;0,072	-2,7452	-1,5746	0,0048	0,0395	0,0066	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	313,15	0,8827;0,1173	-2,7452	-1,4918	0,0022	0,0390	0,0041	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	313,15	0,8286;0,1714	-2,7452	-1,3931	0,0011	0,0372	0,0009	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	313,15	0,7633;0,2367	-2,7452	-1,2739	0,0004	0,0341	0,0000	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	318,15	0,9667;0,0333	-2,7452	-1,6452	0,0124	0,0438	0,0124	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	318,15	0,928;0,072	-2,7452	-1,5746	0,0053	0,0447	0,0082	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	318,15	0,8827;0,1173	-2,7452	-1,4918	0,0026	0,0443	0,0048	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	318,15	0,8286;0,1714	-2,7452	-1,3931	0,0012	0,0425	0,0015	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetona	318,15	0,7633;0,2367	-2,7452	-1,2739	0,0005	0,0391	0,0006	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	298,15	0,9535;0,0465	-2,7452	-1,6409	0,0098	0,0273	0,0057	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	298,15	0,9011;0,0989	-2,7452	-1,5675	0,0063	0,0295	0,0049	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	298,15	0,8417;0,1583	-2,7452	-1,4843	0,0037	0,0311	0,0038	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	298,15	0,7736;0,2264	-2,7452	-1,3889	0,0021	0,0316	0,0016	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	298,15	0,695;0,305	-2,7452	-1,2788	0,0011	0,0309	0,0009	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	303,15	0,9535;0,0465	-2,7452	-1,6409	0,0117	0,0313	0,0071	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	303,15	0,9011;0,0989	-2,7452	-1,5675	0,0072	0,0338	0,0058	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	303,15	0,8417;0,1583	-2,7452	-1,4843	0,0044	0,0356	0,0044	
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	303,15	0,7736;0,2264	-2,7452	-1,3889	0,0024	0,0362	0,0021	

(Continuação)

Solutos	Base de dados				Resultados			
	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow, soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	303,15	0,695;0,305	-2,7452	-1,2788	0,0011	0,0354	0,0012
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	308,15	0,9535;0,0465	-2,7452	-1,6409	0,0139	0,0357	0,0093
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	308,15	0,9011;0,0989	-2,7452	-1,5675	0,0082	0,0385	0,0070
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	308,15	0,8417;0,1583	-2,7452	-1,4843	0,0047	0,0405	0,0055
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	308,15	0,7736;0,2264	-2,7452	-1,3889	0,0026	0,0412	0,0026
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	308,15	0,695;0,305	-0,6337	-1,1581	0,0012	0,0404	0,0019
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	313,15	0,9535;0,0465	-2,7452	-1,6409	0,0165	0,0405	0,0106
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	313,15	0,9011;0,0989	-2,7452	-1,5675	0,0103	0,0436	0,0084
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	313,15	0,8417;0,1583	-2,7452	-1,4843	0,0053	0,0457	0,0065
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	313,15	0,7736;0,2264	-2,7452	-1,3889	0,0029	0,0466	0,0032
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	313,15	0,695;0,305	-2,7452	-1,2788	0,0013	0,0457	0,0025
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	318,15	0,9535;0,0465	-2,7452	-1,6409	0,0196	0,0457	0,0128
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	318,15	0,9011;0,0989	-2,7452	-1,5675	0,0124	0,0491	0,0103
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	318,15	0,8417;0,1583	-2,7452	-1,4843	0,0066	0,0514	0,0076
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	318,15	0,7736;0,2264	-2,7452	-1,3889	0,0033	0,0524	0,0043
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Acetonitrila	318,15	0,695;0,305	-2,7452	-1,2788	0,0017	0,0514	0,0032
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	298,15	0,9688;0,0312	-2,7452	-1,7024	0,0082	0,0234	0,0090
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	298,15	0,9323;0,0677	-2,7452	-1,6983	0,0059	0,0219	0,0069
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	298,15	0,8894;0,1106	-2,7452	-1,6934	0,0042	0,0202	0,0049
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	298,15	0,8379;0,1621	-2,7452	-1,6875	0,0033	0,0182	0,0028
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	298,15	0,775;0,225	-2,7452	-1,6803	0,0027	0,0160	0,0007
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	303,15	0,9688;0,0312	-2,7452	-1,7024	0,0102	0,0270	0,0103
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	303,15	0,9323;0,0677	-0,6337	-0,3501	0,0072	0,0104	0,0077
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	303,15	0,8894;0,1106	-2,7452	-1,6934	0,0055	0,0235	0,0063
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	303,15	0,8379;0,1621	-2,7452	-1,6875	0,0039	0,0212	0,0037
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	303,15	0,775;0,225	-2,7452	-1,6803	0,0033	0,0188	0,0015
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	308,15	0,9688;0,0312	-2,7452	-1,7024	0,0123	0,0310	0,0118
Taurina ⁽²⁰⁾	Água;Etilenoglicol	308,15	0,9323;0,0677	-2,7452	-1,6983	0,0082	0,0292	0,0100

(Continuação)

Base de dados					Resultados			
Soluto	Solvente	Temp. (K)	Razão molar solvente	log K _{ow,soluto}	WALK _{mix}	X _{exp}	X _{cosmo}	X _{GPR}
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	308,15	0,8894;0,1106	-2,7452	-1,6934	0,0060	0,0271	0,0081
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	308,15	0,8379;0,1621	-2,7452	-1,6875	0,0047	0,0247	0,0052
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	308,15	0,775;0,225	-2,7452	-1,6803	0,0038	0,0220	0,0025
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	313,15	0,9688;0,0312	-2,7452	-1,7024	0,0145	0,0353	0,0145
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	313,15	0,9323;0,0677	-2,7452	-1,6983	0,0096	0,0334	0,0119
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	313,15	0,8894;0,1106	-2,7452	-1,6934	0,0069	0,0311	0,0096
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	313,15	0,8379;0,1621	-2,7452	-1,6875	0,0058	0,0285	0,0068
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	313,15	0,775;0,225	-2,7452	-1,6803	0,0049	0,0255	0,0034
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	318,15	0,9688;0,0312	-2,7452	-1,7024	0,0171	0,0400	0,0172
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	318,15	0,9323;0,0677	-2,7452	-1,6983	0,0110	0,0380	0,0144
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	318,15	0,8894;0,1106	-2,7452	-1,6934	0,0077	0,0356	0,0122
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	318,15	0,8379;0,1621	-2,7452	-1,6875	0,0065	0,0327	0,0090
Taurina ⁽²⁰⁾	Água; Etilenoglicol	318,15	0,775;0,225	-2,7452	-1,6803	0,0052	0,0294	0,0056
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	278,85	Puro	-0,0031	0,7710	0,1026	0,2893	0,1056
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	283,65	Puro	-0,0031	0,7710	0,1265	0,3246	0,1261
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	288,35	Puro	-0,0031	0,7710	0,1559	0,3618	0,1570
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	292,95	Puro	-0,0031	0,7710	0,1921	0,4008	0,1917
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	298,05	Puro	-0,0031	0,7710	0,2435	0,4470	0,2442
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	302,85	Puro	-0,0031	0,7710	0,3042	0,4933	0,3030
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	307,15	Puro	-0,0031	0,7710	0,3638	0,5371	0,3697
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	312,35	Puro	-0,0031	0,7710	0,4591	0,5930	0,4590
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	317,15	Puro	-0,0031	0,7710	0,5571	0,6474	0,5549
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetato de Etila	321,55	Puro	-0,0031	0,7710	0,6536	0,6995	0,6521
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	278,85	Puro	-0,0031	-0,3054	0,1491	0,3144	0,1445
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	283,65	Puro	-0,0031	-0,3054	0,1871	0,3507	0,1904
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	288,25	Puro	-0,0031	-0,3054	0,2358	0,3874	0,2357
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	293,55	Puro	-0,0031	-0,3054	0,2939	0,4319	0,2973
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	298,45	Puro	-0,0031	-0,3054	0,3593	0,4753	0,3540

Solutos	Base de dados				(Conclusão)			
	Solvente	Solutos	Solvente	Solutos	Resultados			
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	303,65	Puro	-0,0031	Solvente	Solutos	Solvente	Solutos
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	308,15	Puro	-0,0031	-0,3054	0,4269	0,5237	0,4235
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	313,15	Puro	-0,0031	-0,3054	0,4856	0,5676	0,4890
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	318,65	Puro	-0,0031	-0,3054	0,5578	0,6187	0,5569
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Acetonitrila	323,15	Puro	-0,0031	-0,3054	0,6368	0,6779	0,6487
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	279,25	Puro	-0,0031	-0,3054	0,7251	0,7287	0,7075
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	284,15	Puro	-0,0031	2,3237	0,1998	0,2870	0,1940
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	288,55	Puro	-0,0031	2,3237	0,2323	0,3245	0,2306
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	293,15	Puro	-0,0031	2,3237	0,2697	0,3606	0,2691
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	297,85	Puro	-0,0031	2,3237	0,3103	0,4006	0,3129
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	303,05	Puro	-0,0031	2,3237	0,3609	0,4441	0,3612
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	307,25	Puro	-0,0031	2,3237	0,4231	0,4950	0,4240
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	313,25	Puro	-0,0031	2,3237	0,4817	0,5383	0,4779
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	317,45	Puro	-0,0031	2,3237	0,5659	0,6036	0,5659
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Benzeno	321,75	Puro	-0,0031	2,3237	0,6311	0,6515	0,6312
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	283,65	Puro	-0,0031	2,3237	0,7008	0,7026	0,7037
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	288,25	Puro	-0,0031	3,8002	0,0042	0,0197	0,0033
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	292,85	Puro	-0,0031	3,8002	0,0062	0,0247	0,0073
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	297,95	Puro	-0,0031	3,8002	0,0090	0,0311	0,0119
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	302,95	Puro	-0,0031	3,8002	0,0144	0,0405	0,0187
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	307,25	Puro	1,1274	3,8002	0,0244	0,0533	0,0272
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	312,55	Puro	-0,0031	3,8002	0,0373	0,0692	0,0366
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano	318,35	Puro	-0,0031	3,8002	0,0617	0,1022	0,0586
ε-Caprolactama ⁽¹⁰⁾	Cicloexano					0,1084	0,3060	0,2303

FONTE: ⁽¹⁾(Mei et al., 2024); ⁽²⁾(Yuan et al., 2025); ⁽³⁾(Wu et al., 2016); ⁽⁴⁾(Wünsche et al., 2024); ⁽⁵⁾(Rezaei et al., 2022); ⁽⁶⁾(Santiago et al., 2023); ⁽⁷⁾(Shayanfar; Velaga; Jouyban, 2014); ⁽⁸⁾(Noubigh; Akremi, 2019); ⁽⁹⁾(Shekaari et al., 2021); ⁽¹⁰⁾(Yang, Jianting et al., 2024); ⁽¹¹⁾(Galvão et al., 2024); ⁽¹²⁾(Zhai et al., 2024); ⁽¹³⁾(Sayari et al., 2022); ⁽¹⁴⁾(Silveira et al., 2023); ⁽¹⁵⁾(Wang, Guangle et al., 2020); ⁽¹⁶⁾(Zhan et al., 2023); ⁽¹⁷⁾(Torres-Cardozo et al., 2023); ⁽¹⁸⁾(Yao et al., 2024); ⁽¹⁹⁾(Kodide; Asadi; Thati, 2022); ⁽²⁰⁾(Gong; Li; Rohani, 2022)