



THAYNARA DE FREITAS LOPES

**PREDIÇÃO DA PERCEPÇÃO SENSORIAL DE
EMOLIENTES POR CARACTERÍSTICAS FÍSICO-
QUÍMICAS**

LAVRAS – MG

2021

THAYNARA DE FREITAS LOPES

**PREDIÇÃO DA PERCEPÇÃO SENSORIAL DE EMOLIENTES POR
CARACTERÍSTICAS FÍSICO-QUÍMICAS**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do curso de Engenharia Química, para obtenção do título de Bacharel.

Prof. Dr. Cleiton Antônio Nunes

Orientador

Prof. Dr. Matheus Puggina de Freitas

Coorientador

LAVRAS – MG

2021

Dedico este trabalho a todos que participaram da minha jornada na UFLA
Aos meus familiares, em especial, aos meus pais, que sempre incentivaram meus estudos
E aos meus amigos, que sempre estiveram comigo nos momentos bons e ruins

AGRADECIMENTOS

À Natura e a todos envolvidos no projeto que alimentou este trabalho, pela imensa parceria, conselhos e colaboração, em especial a Cinthia, minha tutora que permitiu que este trabalho acontecesse, a Rayani, minha parceira de laboratório, ao Ivan por toda ajuda e a minha gestora Elisângela por toda confiança.

Ao professor e doutor Cleiton Nunes por aceitar o desafio e por toda ajuda durante o TCC;

A todos os meus amigos e amigas de UFLA pela grande amizade, carinho e apoio durante toda a graduação!

Às minhas amigas de Campinas pela motivação e ajuda em tantos momentos difíceis;

A todos que acompanharam diretamente ou indiretamente este trabalho, o meu mais profundo agradecimento.

RESUMO

As características sensoriais das formulações cosméticas no âmbito de cuidado pessoal são fortemente influenciadas pelas matérias-primas presentes em sua lista de ingredientes. Os emolientes se destacam nesse quesito, uma vez que possuem como finalidade principal a melhoria da percepção sensorial do uso na pele. O presente trabalho teve como objetivo construir correlações matemáticas através de propriedades físico-químicas e de atributos sensoriais, com o propósito de prever o comportamento sensorial de um emoliente. Dessa forma, a caracterização físico-química e sensorial de vinte e três emolientes foi realizada com a Natura S/A. Os modelos matemáticos foram então criados através dos métodos multivariados como Análise de Componentes Principais (PCA) e Regressão Linear Múltipla (MLR). Os resultados mostraram uma boa capacidade preditiva para o modelo construído para o atributo sensorial brilho imediato que é influenciado pela polarizabilidade, receptores de ligação de hidrogênio e a tensão superficial. Para os outros atributos sensoriais investigados, foi possível concluir que os modelos matemáticos obtidos não tiveram uma boa capacidade preditiva para amostras externas à calibração. Isso pode ter ocorrido devido ao número pequeno de observações, tanto para calibração e sobretudo para teste.

Palavras-chave: Cosméticos. Organoléptico. Quimiometria.

ABSTRACT

The sensory characteristics of cosmetic formulations in the sphere of personal care are strongly influenced by the raw materials present in their list of ingredients. Emollients stand out in this topic, as their main objective is the improvement of sensory perception when used on the skin. The present work aimed to build mathematical correlations through physical-chemical properties, and sensory attributes, to predict sensory properties of an emollient. Thus, the physical-chemical and sensory characterization of twenty-three emollients was carried out with Natura S/A. The mathematical models were created using multivariate methods such as Principal Component Analysis (PCA) and Multiple Linear Regression (MLR). The results showed a good predictive model for the immediate gloss attribute which is influenced by polarizability, hydrogen bond receptors, and surface tension. For the other sensory attributes investigated, it was possible to conclude that the mathematical models obtained did not have a good predictive capacity for the samples in the test group. This could be due to the small number of data, both for calibration and especially for testing.

Keywords: Cosmetics. Organoleptic. Chemometrics.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Emolientes do tipo hidrocarboneto..... | 20 |
| Figura 2 – Emolientes do tipo éter | 21 |
| Figura 3 – Emoliente do tipo álcool graxo..... | 22 |
| Figura 4 – Emolientes do tipo éster..... | 24 |
| Figura 5 – Emoliente do tipo triglicerídeo sintético..... | 26 |
| Figura 6 – Emolientes do tipo silicone..... | 28 |
| Figura 7 – Camadas da pele..... | 29 |
| Figura 8 – Camadas da epiderme..... | 29 |
| Figura 9 – Representação esquemática da seção transversal da camada córnea..... | 30 |
| Figura 10 – Modelo “tijolos e cimento” da camada córnea..... | 31 |
| Figura 11 – Cadeia de percepção sensorial..... | 32 |
| Figura 12 – Comportamento do líquido devido à força de cisalhamento..... | 37 |
| Figura 13 – Camadas de fluido deslizando uma sobre a outra..... | 37 |
| Figura 14 – Comportamento reológico dos fluidos em função da taxa de deformação..... | 38 |
| Figura 15 – Tipos de geometrias utilizadas em reômetros, em sequência: geometria de cilindros concêntricos, cone-placa e placas paralelas..... | 39 |
| Figura 16 - Interface gás-líquido..... | 40 |
| Figura 17 – Métodos para a obtenção das tensões superficiais e interfaciais (método das placas de Wilhelm e método do anel de du Noüy, respectivamente) | 41 |
| Figura 18 – Densímetro digital..... | 52 |
| Figura 19 – Refratômetro digital..... | 53 |
| Figura 20 – Balança de umidade..... | 53 |
| Figura 21 – Geometria Peltier Plate Tribo (4 bolas) | 54 |
| Figura 22 – Reômetro..... | 54 |
| Figura 23 – Tensiômetro..... | 55 |
| Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I..... | 65 |
| Figura 25 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 71 |

LISTA DE FIGURAS

- Figura 26 – Gráficos das componentes principais PC1 e PC2 com os pesos das propriedades físico-químicas do grupo I.....75
- Figura 27 – Gráficos das componentes principais PC1 e PC2 com os pesos das propriedades físico-químicas do grupo II.....75

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 1 – Ácidos carboxílicos e álcoois utilizados como reagentes na reação de esterificação | 23 |
| Tabela 2 – Composição aproximada de ácidos graxos de alguns óleos vegetais..... | 25 |
| Tabela 3 – Atributos sensoriais e definição..... | 33 |
| Tabela 4 – Emolientes analisados no painel treinado..... | 49 |
| Tabela 5 – Atributos sensoriais e método de avaliação..... | 50 |
| Tabela 6 – Resultado das intensidades médias dos atributos sensoriais..... | 59 |
| Tabela 7 – Dados físico-químicos dos emolientes grupo I (n=13)..... | 61 |
| Tabela 8 - Dados físico-químicos dos emolientes grupo II (n=12)..... | 62 |
| Tabela 9 – Matriz de correlação entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I..... | 63 |
| Tabela 10 – Matriz de correlação entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 64 |
| Tabela 11 – Matriz de correlação entre parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo I (n=13)..... | 73 |
| Tabela 12 – Matriz de correlação entre parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo II (n=20)..... | 73 |
| Tabela 13 – Parâmetros de desempenho de modelos MLR para a predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I..... | 77 |
| Tabela 14 – Erros percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo II..... | 78 |
| Tabela 15 – Parâmetros de desempenho de modelos MLR para a predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 80 |
| Tabela 16 – Erros percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo II..... | 81 |
| Tabela 17 – Classificação dos atributos sensoriais nas classes 1 (baixo), 2 (médio) e 3 (alto)..... | 84 |
| Tabela 18 – Porcentagem de acertos dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I..... | 85 |
| Tabela 19 – Porcentagem de acertos dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I..... | 86 |

LISTA DE SIGLAS

| | |
|-------------|---|
| ANOVA | Análise de Variância |
| AGL | Ácidos Graxos Livres |
| BI | Brilho na Pele Imediato |
| CCT | Triglicerídeo Caprílico/Cáprico |
| CD | Ciclopentasiloxano (e) Dimeticonol |
| CO | Óleo de Canola |
| CosIng | Base de Dados de Ingredientes Cosméticos |
| CPU | Unidade Central de Processamento |
| D | Deslizamento |
| D350 | Dimeticona 350 |
| D50 | Dimeticona 50 |
| DD | Decano (e) Dodecano |
| DE | Éter Dicaprílico |
| DM | Malato de Diisostearil |
| DO | Decil Oleato |
| DSCGSAC | Succinato de Diheptilo (e) Capriolil Glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 |
| DSCGSAC 350 | Succinato de Diheptilo (e) Capriolil Glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 |
| E | Espalhabilidade |
| EO | Oleato de Etila |
| FGI | Filme Gorduroso Imediato |

LISTA DE SIGLAS

| | |
|-------|--|
| FGR | Filme Gorduroso Residual |
| HO | Óleo de Girassol |
| II | Isonanoato de Isononila |
| ILPGD | Laurato de Isoamil (e) Diheptanoato de Propilenoglicol |
| IM | Miristato de isopropila |
| INCI | Nomenclatura Internacional de Ingredientes Cosméticos |
| IP | Palmitato de isopropila |
| LDA | Análise Discriminante Linear |
| LOO | <i>Leave-one-out</i> |
| MLR | Regressão Linear Múltipla |
| O | Octildodecanol |
| OR | Oleosidade Residual |
| P | Pegajosidade |
| PA | Ponto de Absorção |
| PC | Caprilato de Propilheptilo |
| PCA | Análise de Componente Principal |
| PLS | Parcial de Mínimos Quadrados |
| POL | Polarizabilidade |
| SP | Superfície Polar |
| TS | Toque Seco |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|----------|----------------------------------|
| C | Carbono |
| H | Hidrogênio |
| O | Oxigênio |
| R | Radical linear |
| A | Radical alifático |
| S | Silício |
| w | Coefficiente Estequiométrico |
| a | Solvente a |
| b | Solvente b |
| Z | Substância Z |
| m | Massa (g) |
| V | Volume (cm ³) |
| d | Densidade (g/cm ³) |
| n_{21} | Índice de Refração |
| v_1 | Velocidade no meio 1 (m/s) |
| v_2 | Velocidade no meio 2 (m/s) |
| μ_s | Coefficiente de fricção estático |
| μ_k | Coefficiente de fricção cinético |
| F_s | Força Estática (N) |
| F_k | Força Cinética (N) |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|-------------------------------|--|
| τ | Tensão de cisalhamento (Pa) |
| $\frac{du}{dy}$ | Gradiente de Velocidade (s ⁻¹) |
| μ | Viscosidade (cP) |
| γ_s | Tensão Superficial (mN/m) |
| γ_i | Tensão Interfacial (mN/m) |
| A | Área (m ²) |
| F | Força (N) |
| L | Comprimento da placa (m) |
| r | Raio do anel (m) |
| θ | Ângulo entre a placa e a superfície do líquido sobre ela (rad) |
| x | Variável descritiva |
| y | Variável resposta |
| Y | Matriz de vetor y |
| X | Matriz de vetor x |
| e | Vetor resíduos |
| b | Vetor de coeficientes de regressão |
| n | Número de amostras |
| RMSE _C | Raiz do erro quadrático médio da calibração |
| R ² _{cal} | Quadrado do coeficiente de correlação da calibração |
| RMSE _{CV} | Raiz do erro quadrático médio da validação cruzada |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|------------------|--|
| R^2_{cv} | Quadrado do coeficiente de correlação da validação cruzada |
| $RMSE_{Y-rand}$ | Raiz do erro quadrático médio do teste de randomização de y |
| R^2_{y-rand} | Quadrado do coeficiente de correlação do teste de randomização de y |
| $R^2_{p-y-rand}$ | Quadrado do coeficiente de correlação p do teste de randomização de y |
| $RMSE_p$ | Raiz do erro quadrático médio da predição externa |
| R^2_{pred} | Quadrado do coeficiente de correlação da predição externa |
| R^2_m | Quadrado do coeficiente de correlação modificado |
| R^2 | Quadrado do coeficiente de correlação |
| r^2 | Quadrado do coeficiente de correlação entre os valores medidos e preditos |
| r_0^2 | Quadrado do coeficiente de correlação entre os valores medidos e preditos com intersecção no eixo zero |

SUMÁRIO

| | |
|---|------------|
| 1 INTRODUÇÃO | 16 |
| 2 OBJETIVOS | 17 |
| 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 18 |
| 3.1 Emolientes | 18 |
| 3.1.1 Classificação dos Emolientes | 19 |
| 3.2 Pele | 29 |
| 3.3 Análise sensorial de emolientes | 32 |
| 3.4 Propriedades físico-químicas relevantes em emolientes | 34 |
| 3.5 Quimiometria | 42 |
| 3.5.1 Regressão linear múltipla (MLR) | 43 |
| 3.5.2 Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)..... | 44 |
| 3.5.3 Análise Discriminante Linear (LDA)..... | 45 |
| 3.6 Predição de atributos sensoriais de emolientes por medidas indiretas | 45 |
| 4 METODOLOGIA..... | 49 |
| 4.1 Análise Sensorial..... | 49 |
| 4.2 Dados Teóricos e Experimentais | 51 |
| 4.2.1 Dados Teóricos..... | 51 |
| 4.2.2 Dados Instrumentais | 52 |
| 4.3 Análise Estatística..... | 55 |
| 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES | 58 |
| 5.1 Modelos preditivos por MLR | 75 |
| 5.2 Modelos classificatórios por LDA | 83 |
| 6 CONCLUSÕES..... | 87 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 88 |
| APÊNDICE A – Metodologia dos dados instrumentais..... | 95 |
| APÊNDICE B – Desvio padrão das Intensidades Médias dos atributos sensoriais | 101 |
| APÊNDICE C – Resultados dos ensaios do coeficiente de fricção e viscosidade.. | 102 |
| APÊNDICE D – Gráficos de correlação linear entre os parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo I | 104 |

| | |
|--|------------|
| APÊNDICE E – Gráficos de correlação linear entre os parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 105 |
| APÊNDICE F - Parâmetros de desempenho e coeficientes de regressão dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I | 106 |
| APÊNDICE G - Parâmetros de desempenho e coeficientes de regressão dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 109 |
| APÊNDICE H - Porcentagem de acertos e coeficientes de regressão dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I | 111 |
| APÊNDICE I - Porcentagem de acertos e coeficientes de regressão dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II..... | 117 |

1 INTRODUÇÃO

A percepção sensorial em formulações cosméticas pode ser bastante complexa, uma vez que é determinada por diferentes parâmetros, desde a escolha das matérias-primas e suas interações até a organização estrutural do sistema (TERESCENCO *et al.*, 2018). Uma categoria de matéria-prima amplamente utilizada nas formulações devido à sua capacidade de interferir e modular características sensoriais de um produto são os emolientes. Os emolientes são considerados ingredientes multifuncionais, uma vez que apresentam diversas aplicações, como suavizar e amaciar a pele (AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA, 2010), solubilizar e intensificar a permeação de vários ingredientes, revestir partículas, proteger a pele contra poluição e também, podem agir como controladores de brilho em formulações de maquiagem (DEDEREN; CHAVAN; RAWLINGS, 2012). Atualmente, em um cenário que se torna indispensável o uso de produtos antissépticos para as mãos, tais matérias-primas ganham bastante relevância, uma vez que a ANVISA (2010), recomenda utilizar emolientes em formulações alcoólicas a fim de evitar o ressecamento da pele.

Embora os emolientes possuam inúmeras aplicações na indústria cosmética, pouco se sabe sobre a relação de suas propriedades físicas e químicas com a percepção sensorial do consumidor. A avaliação dos atributos sensoriais de produtos cosméticos é tradicionalmente baseada em tentativa e erro por parte do formulador. Consequentemente, a escolha dos emolientes para a criação de uma formulação com características sensoriais ideais tende a ser mais subjetiva.

2 OBJETIVOS

O objetivo principal do trabalho foi estabelecer correlações que combinem características físico-químicas com atributos sensoriais para predições relacionadas ao uso e avaliação de emolientes.

Os objetivos específicos consistiram em:

- Caracterizar vinte e três emolientes líquidos através dos aspectos físico-químicos para a construção de modelos matemáticos preditivos;
- Avaliar o painel treinado sensorial, investigando os seguintes atributos: deslizamento, pegajosidade, toque seco, brilho imediato na pele, brilho residual na pele, espalhabilidade, filme aveludado, filme gorduroso imediato, filme gorduroso residual, ponto de absorção, oleosidade imediata e oleosidade residual;
- Avaliar o potencial e a confiabilidade dos modelos matemáticos obtidos no trabalho, conferindo os pontos fortes e limitações dos modelos.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Emolientes

CosIng, a base de dados da Comissão Europeia para informações sobre substâncias e ingredientes cosméticos, define os emolientes como substâncias capazes de suavizar e amaciar a pele (EUROPEAN COMMISSION, 2020). Tal definição, não engloba totalmente a natureza complexa dos emolientes, suas várias funções e formas de aplicação (MARKS, 1997). Além de suavizar e amaciar a pele, os emolientes ainda podem solubilizar e intensificar a permeação de vários ingredientes, revestir partículas, proteger a pele contra poluição e também, podem agir como controladores de brilho em formulações de maquiagem (DEDEREN; CHAVAN; RAWLINGS, 2012).

Depois da água, os emolientes são o segundo maior grupo de ingredientes utilizado nos produtos de cuidados com a pele e cabelo. Os emolientes geralmente estão incluídos na fase oleosa e podem ocupar de 5 a 30% da lista de ingredientes de uma emulsão óleo em água. Para emulsões água em óleo ou até mesmo em formulações anidras, a concentração de emolientes pode ser ainda maior (ALANDER, 2012).

De forma geral, os emolientes são substâncias oleosas encontradas na forma líquida ou sólida e sua composição pode variar bastante. A inclusão de tais ingredientes influencia a performance da formulação cosmética em termos de consistência, aspectos sensoriais, administração de ativos, hidratação e lubricidade da pele. Segundo Calixto e Campos (2017), a escolha das matérias-primas é considerada o passo mais importante no fluxo de pesquisa e desenvolvimento de um produto. Ao formular cosméticos, além de conhecer os aspectos sensoriais, também é importante conhecer as estruturas químicas dos emolientes, a polaridade, a viscosidade, a compatibilidade/interação deste com outros ingredientes da fórmula, sua estabilidade, toxicidade e outros.

A polaridade dos emolientes geralmente, define o resultado final da sensação na pele. Quando apolares, os emolientes trazem um sensorial mais pesado e pegajoso e quando polares, apresentam um sensorial mais leve e suave. Segundo Alander (2012), se a viscosidade do emoliente for alta, pode passar a impressão de ser gorduroso e até desagradável, quando a viscosidade é baixa, a sensação na pele parece ser mais fina e

suave. Além disso, a estrutura química do emoliente, como a presença de ramificações e ciclos, afeta o tamanho e a forma da molécula, podendo acarretar em mudanças na viscosidade. A interação com outras substâncias que compõem um produto cosmético pode também ser determinada pela polaridade e viscosidade do emoliente. Em uma emulsão, a solubilidade do emulsificante e sua capacidade de formar cristais líquidos e outros agregados de surfactante são fortemente dependentes da polaridade da fase oleosa no sistema (ALANDER, 2012). Wiechers *et al.* (2004) conseguiram prever uma profunda influência entre a polaridade da fase em que o princípio ativo de uma formulação se encontra e o fluxo do princípio ativo para a pele.

3.1.1 Classificação dos Emolientes

Para classificar os emolientes de uma forma abrangente, estes podem ser baseados em hidrocarbonetos, éteres, álcoois graxos, ésteres, óleos e gorduras e silicones de acordo com suas estruturas químicas.

Emolientes baseados em Hidrocarbonetos

Do petrolato e do óleo mineral até o uso mais recente de hidrocarbonetos de cadeia ramificada alifática ou isoparafinas, tal classe possui um extenso histórico nas indústrias cosméticas (ANSALDI; LABA, 2007). O sucesso dos hidrocarbonetos em formulações de cuidado pessoal pode ser relacionado às suas diferentes propriedades positivas, como boa compatibilidade com a pele, bom desempenho de limpeza e alta estabilidade (WEBER *et al.*, 2019).

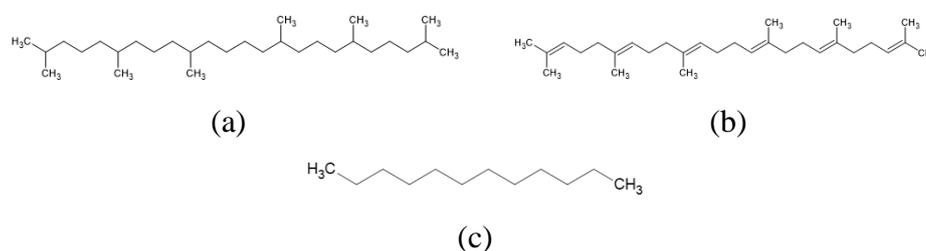
Segundo Solomons e Fryhle (2001), o grupo hidrocarbonetos consiste em moléculas com átomos de carbono (C) e hidrogênio (H), desprovidos ou não de insaturações e/ou ramificações. Além disso, as substâncias incluídas nesse grupo podem ser cíclicas ou acíclicas. Em relação às propriedades físicas, as forças de atração encontradas nos hidrocarbonetos são do tipo dipolo induzido-dipolo induzido. Além disso, os hidrocarbonetos são compostos pouco polares, completamente insolúveis em água, mas solúveis em solventes não muito polares (BARBOSA, 2011).

Alguns hidrocarbonetos, como a gasolina e a querosene podem causar a degradação da camada lipoproteica produzida pela epiderme quando em contato com a

pele. No entanto, em indústrias de cosméticos, alcanos de massa molecular mais elevada são comumente utilizados em diferentes formulações, devido a sua capacidade de emoliência (BARBOSA, 2011).

Na Figura 1, alguns hidrocarbonetos encontrados nas indústrias cosméticas com a função emoliente são apresentados, respectivamente: esqualano, esqualeno e dodecano.

Figura 1 - Emolientes do tipo hidrocarboneto: (a) esqualano, (b) esqualeno e (c) dodecano.



Fonte: da autora (2021).

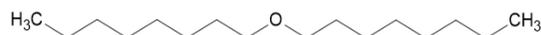
Emolientes baseados em Éteres

Utilizados como intermediários nas indústrias de cosméticos, fibras sintéticas, filmes, resinas, tintas e entre outros, tais compostos são de grande relevância mundial. A classe é caracterizada por um átomo de oxigênio (O) ligado a dois átomos de carbono (FIGURA 2), com a fórmula geral R1-O-R2, R1-O-A1 ou A1-O-A2. Os éteres são obtidos através da desidratação de álcoois ou por deslocamento nucleofílico de halogenetos de alquila por alcóxidos (BARBOSA, 2011).

Uma polaridade de baixa intensidade pode ser referida aos éteres, uma vez que o oxigênio ligado aos dois carbonos possui uma hibridação sp^2 , conferindo a molécula um ângulo de 110° e fazendo com que os momentos de dipolo das ligações C-O se somem. Assim como os álcoois, os éteres podem formar ligação de hidrogênio, o que os torna solúveis em água. A solubilidade dos éteres, assim como em outras funções orgânicas, depende do tamanho da cadeia carbônica da molécula, ou seja, quanto maior a cadeia, menos solúvel em água (BARBOSA, 2011).

A Figura 2 mostra a estrutura do éter dicaprílico, um emoliente líquido claro, sem cor e com odor característico, de origem vegetal (óleos vegetais). Em quesitos sensoriais, proporciona um toque seco e não oleoso à pele (SPECIALCHEM, 2021b).

Figura 2 - Emoliente do tipo éter.



Fonte: da autora (2021).

Emolientes baseados em Álcoois Graxos

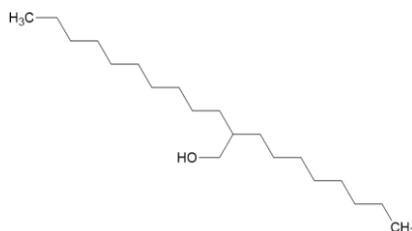
Os álcoois graxos são compostos largamente utilizados na indústria cosmética como precursores de viscosidade, emoliência e propriedades opacificantes (BARROS, 2021). Em termos estruturais, os álcoois possuem um grupo hidroxila (OH) ligado a um átomo de carbono (C) de um grupo alquila, alquenila, alquinila ou de um átomo de carbono saturado que é ligado a um anel benzênico (SOLOMONS; FRYHLE, 2001). Especificamente, os chamados álcoois graxos, são álcoois alifáticos com cadeias contendo entre 6 e 22 carbonos, obtidos de óleos e gorduras (BARROS, 2021).

As propriedades físicas dos álcoois sofrem interferência da hidroxila e dependem do tamanho da cadeia carbônica da molécula. A ligação de hidrogênio encontrada na hidroxila dos álcoois é bastante polar, ocorrendo então, forte atração eletrostática entre esses compostos. A solubilidade dos álcoois na água é maior do que a dos hidrocarbonetos, uma vez que a introdução de um grupo hidroxila na estrutura química faz com que a solubilidade aumente. No entanto, com o aumento do tamanho da porção de hidrocarbonetos (parte apolar) da molécula, a solubilidade diminui gradualmente (BARBOSA, 2011).

Alguns álcoois de cadeia longa são utilizados sozinhos como emolientes, mas dessa maneira não são tão eficazes (MIYAHARA, 2017). Geralmente, os álcoois graxos de cadeia longa são adicionados a uma formulação com a função de estabilizar ou/e controlar viscosidade (ALANDER, 2012). O efeito emoliente é alcançado secundariamente quando o álcool interage com o sistema emulsificador (nesse caso, surfactantes hidrofílicos) formando uma auto-estrutura chamada alfa-gel que possui altas propriedades oclusivas e de retenção de umidade (MIYAHARA, 2017).

A Figura 3 mostra a estrutura do octildodecanol, um emoliente inodoro com aparência límpida, obtido através de óleos e gorduras naturais. Em quesitos sensoriais, proporciona à pele uma sensação macia e suave (SPECIALCHEM, 2021b).

Figura 3 - Emoliente do tipo álcool graxo.



Fonte: da autora (2021).

Emolientes baseados em Ésteres

Os ésteres são um grupo químico empregado em vários de tipos de indústria ao redor do mundo na produção de papel, explosivos, plásticos, resinas, lubrificantes, biocombustíveis e cosméticos (WILSON; LOUGHRAN, 2017). A popularidade de tais compostos pode ser explicada devido a sua versatilidade, uma vez que dentro do grupo, existe um grande número de ingredientes com diferentes propriedades (ALANDER, 2012).

Ésteres são compostos orgânicos obtidos pela reação entre um ácido carboxílico e um álcool catalisado por um ácido forte (SOLOMONS; FRYHLE, 2001). Podem também ser formados através da reação de ácidos inorgânicos, anidridos ácidos, halogênios e entre outros compostos, porém, a reação de um ácido carboxílico com um álcool é a mais conhecida (ANTUNES, 2009). De forma básica, a síntese de um éster pode ser exemplificada pela reação abaixo (REAÇÃO 1).



De acordo com Wilson e Loughran (2017), a reação inversa da esterificação, ou seja, a quebra do éster para álcool e ácido carboxílico deve ser levada em conta na hora

da formulação, uma vez que, a hidrólise de tal classe pode ocorrer em meios ácidos ou básicos ($\text{pH} < 5$ e $\text{pH} > 10$).

A Tabela 1 apresenta os ácidos carboxílicos e álcoois mais comumente utilizados na síntese do éster.

Tabela 1 – Ácidos carboxílicos e álcoois utilizados como reagentes na reação de esterificação.

| Álcoois | Ácidos carboxílicos |
|--------------------------|----------------------------|
| Etanol | Ácido caprílico |
| Isopropanol | Ácido cáprico |
| Etilenoglicol | Ácido cítrico |
| Propilenoglicol | Ácido palmítico |
| Glicerol | Ácido oleico |
| Sorbitol | Ácido láurico |
| Polietilenoglicol | Ácido esteárico |

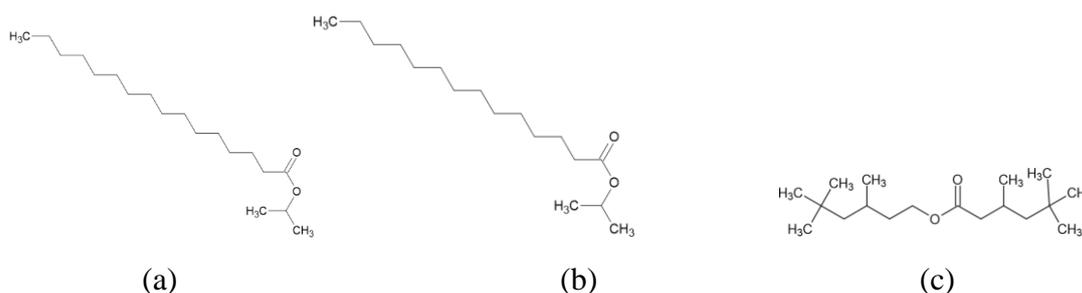
Fonte: da autora (2021).

Ainda segundo Wilson e Loughran (2017), nos ésteres de maior massa molar, a força intermolecular atuando de forma dominante é a força de London (dipolo induzido-dipolo induzido). Além disso, são apolares e insolúveis em água. No caso dos ésteres de menor massa molar as forças dipolo-dipolo são predominantes, são polares e pouco solúveis em água (DIAS, 2021).

O tamanho da cadeia carbônica dos ésteres influencia diretamente sua finalidade. Ésteres de cadeia curta (C2-C15) são moléculas voláteis com características aromatizantes, como por exemplo, o acetato de benzila que é comumente utilizado em fragrâncias. Cadeias longas de ésteres ($> \text{C}30$) podem ser usadas como estruturantes em cosméticos sólidos e agentes de viscosidade ou/e estabilizantes em emulsões, como o palmitato de cetila. Ésteres de cadeia média (C15-C30) doam à formulação uma característica sensorial mais seca se comparado a óleos, sendo então amplamente utilizados como emolientes. Além disso, os ésteres de cadeia média possuem a função de solubilizar de filtros orgânicos UV e dispersar de pigmentos (WILSON; LOUGHRAN, 2017).

Na Figura 4, alguns ésteres encontrados nas indústrias cosméticas com a função emoliente são apresentados, respectivamente, o palmitato de isopropila, miristato de isopropila e isononanoato de isononila.

Figura 4 - Emolientes do tipo éster: (a) palmitato de isopropila, (b) miristato de isopropila e (c) isononanoato de isononila.



Fonte: da autora (2021).

Emolientes baseados em triglicerídeos

Os emolientes à base de óleos naturais e gorduras de origem animal ou vegetal foram os primeiros a serem utilizados em formulações cosméticas para cuidado com a pele. Segundo Miyahara (2017), os óleos vegetais mais comumente usados em cosméticos são o azeite de oliva, óleo de abacate, óleo de gergelim, óleo de amêndoa, óleo de farelo de arroz, óleo de cártamo, manteiga de karité, óleo de camélia, óleo de rícino, óleo de noz de macadâmia e as gorduras e óleos animais mais comumente usados são o sebo bovino, sebo de cavalo e óleo de gema de ovo.

Os óleos e gorduras naturais têm em sua composição majoritariamente os triglicerídeos. Os triglicerídeos são constituídos por uma molécula de glicerol e três moléculas de ácidos graxos (podem ser todas iguais ou não). Os ácidos graxos que constituem os triglicerídeos são monocarboxílicos de cadeia longa e linear, com número par de átomos de carbono e podem ser saturados ou insaturados. Quando insaturados, os ácidos graxos são mais reativos e mais propensos a termo-oxidação (CARVALHO, 2017).

Na Tabela 2, a composição aproximada de ácidos graxos para alguns óleos vegetais comumente encontrados no ramo cosmético, são apresentadas.

Tabela 2 – Composição aproximada de ácidos graxos de alguns óleos vegetais.

| Óleo | C8:0 | C10:0 | C12:0 | C14:0 | C16 | C18:0 | C18:1 | C18:2 | C18:3 |
|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| Soja | | | | | 9-13 | 3-5 | 17-30 | 48-58 | 5-11 |
| Colza | | | | | 4-5 | 1-2 | 60-64 | 18-21 | 7-10 |
| Oliva | | | | | 7-20 | 0-4 | 56-85 | 4-20 | 0-1 |
| Palma | | | | 0-1 | 43-45 | 4-5 | 38-42 | 9-10 | |
| Coco | 5-11 | 4-9 | 40-50 | 15-20 | 7-12 | 1-5 | 4-10 | 1-3 | |

Fonte: adaptado de Alander (2012).

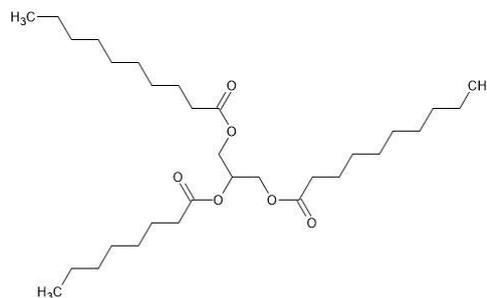
De acordo com Miyahara, (2017), os óleos naturais possuem uma polaridade mais alta e a retenção de umidade mais fraca se comparado com os hidrocarbonetos. A insaturação dos ácidos graxos contidos em alguns óleos, como o óleo de soja, colza e girassol pode restringir o uso em aplicações cosméticas, pois são difíceis de estabilizar contra a oxidação, promovendo uma vida útil curta em produtos de cuidados com a pele (ALANDER, 2012).

Os triglicerídeos sintéticos também são formados pela reação da glicerina com três equivalentes de ácido graxo, porém por serem moléculas sintéticas, trazem a vantagem da escolha dos reagentes (preferencialmente ácidos graxos saturados) para promover uma melhor estabilidade à oxidação.

De acordo com Alander (2012), o triglicerídeo sintético mais utilizado em cosméticos é o triglicerídeo caprílico/cáprico, formado pela esterificação do glicerol por uma mistura de ácidos caprílico e cáprico. Tal substância possui viscosidade e polaridade intermediárias. Além disso, possui alta resistência à oxidação por ser totalmente saturado. A Figura 5 mostra a estrutura do triglicerídeo caprílico/cáprico.

Ainda segundo Alander (2012), existem emolientes análogos aos triglicerídeos caprílico/cáprico, por exemplo, diésteres de propilenoglicol e triésteres de glicerol e ácido etilhexanóico sintético ("ácido octanóico").

Figura 5 - Emoliente do tipo triglicerídeo sintético.



Fonte: da autora (2021).

Emolientes baseados em silicones

Os silicones são uma classe ampla de compostos sintéticos de polímeros ou outros materiais com ligações de siloxano e foram descobertos pelo químico britânico F.S. Kipping em 1901 (MAXON; STARCH, 2016). As moléculas desse grupo de emoliente são combinações de silício (Si), oxigênio (O) e hidrocarbonetos, propiciando propriedades físico-químicas diferentes dos hidrocarbonetos e ésteres (ALANDER, 2012).

De acordo com Colas (2005), polímeros de silicone são obtidos a partir da sílica e do cloreto de metila em uma síntese de três etapas: síntese de clorossilano; hidrólise de clorossilano e a polimerização e policondensação. A síntese de clorossilano segue o processo direto de Rochow, usando silício metálico obtido a partir da redução de areia em alta temperatura e cloreto de metila obtido por condensação de metanol com ácido clorídrico. A reação ocorre em um leito fluidizado de pó de silício metálico no qual flui uma corrente de cloreto de metila, normalmente a temperaturas de 250 a 350 ° C e a pressões de 1 a 5 bar, onde uma mistura de diversos dimetildiclorossilano são obtidos pela Reação 2.

| | | Rendimento (% peso) | Ponto de Ebulição | |
|---|-----------------------|------------------------|----------------------|-----|
| $w_1 Si + w_2 CH_3Cl \xrightarrow{cat}$ | Me_2SiCl_2 | > 50 | 70,0 | |
| | $MeSiCl_3$ | 10 – 30 | 66,4 | |
| | Me_3SiCl | < 10 | 57,9 | (2) |
| | $MeHSiCl_2$ | < 5 | 41,0 | |
| | <i>outros silanos</i> | 5 | | |

A etapa da hidrólise de clorossilano consiste na obtenção dos polidimetilsiloxanos através da hidrólise do dimetildiclorossilano na presença de excesso de água.

A etapa de polimerização e policondensação consistem polimerizar estruturas cíclicas ou em condensar as estruturas lineares ou para gerar macromoléculas de comprimento satisfatório para a maioria das aplicações dos silicones. As cadeias lineares podem ser condensadas em uma reação catalisada por ácido ou base. As cadeias cíclicas, $(R_2SiO)_m$, podem ser abertas e polimerizadas para formar longas cadeias lineares em uma reação catalisada por ácidos ou bases.

As propriedades físico-químicas que fazem os silicones se destoarem dos outros grupos de emolientes são atribuídas à força e flexibilidade da ligação Si–O, seu caráter parcialmente iônico e às baixas forças interativas entre os grupos metila apolares (O'LENICK, 2000). Devido aos seus compostos substituintes orgânicos que rodeiam a cadeia de silicone, tal classe pode ser considerada hidrofóbica. A estabilidade de tais compostos também pode ser explicada pelas ligações Si–O e Si–C, conferindo à cadeia polimérica resistência e inércia (LEE, 1999).

As diferenças no tamanho da cadeia Si–O e as modificações nos grupos orgânicos substituintes que a rodeiam, formam os óleos, as graxas, os elastômeros e as resinas de silicone. Na indústria de cosméticos, a forma mais comum e utilizada são os óleos de silicone que geralmente são poli-dimetil-siloxanas (PDMS), ou seja, compostos que têm como a porção orgânica o grupo metila. Assim como os hidrocarbonetos, os óleos de silicone são lubrificantes e têm capacidade de espalhar na pele, porém com a vantagem

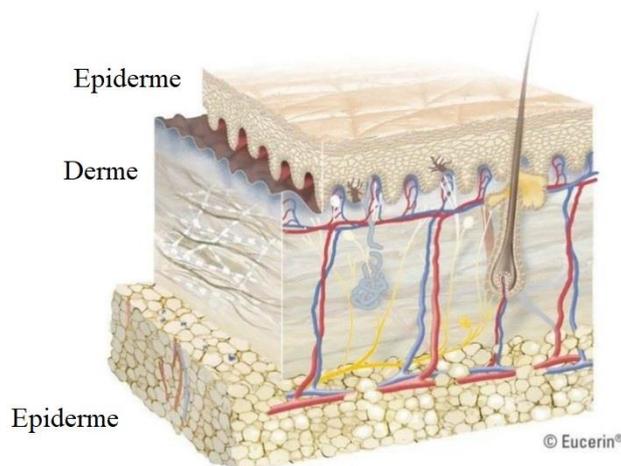
3.2 Pele

A incorporação de emolientes nas diferentes formas cosméticas é uma prática comum devido à sua ação na pele, uma vez que os emolientes podem agir de forma oclusiva e favorecer a retenção de água. O resultado é uma pele mais elástica, macia e lubrificada (PARENTE; GÁMBARO; SOLANA, 2005).

A pele é o maior órgão do corpo humano e corresponde a 16% do peso corporal. Este órgão desempenha funções de proteção contra a desidratação, atrito, invasão de microrganismos, raios ultravioleta (através do pigmento produzido na epiderme: melanina), formação da vitamina D₃, termorregulação e ainda possui terminações nervosas sensoriais, permitindo que o sistema nervoso central saiba o que acontece no ambiente (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2013).

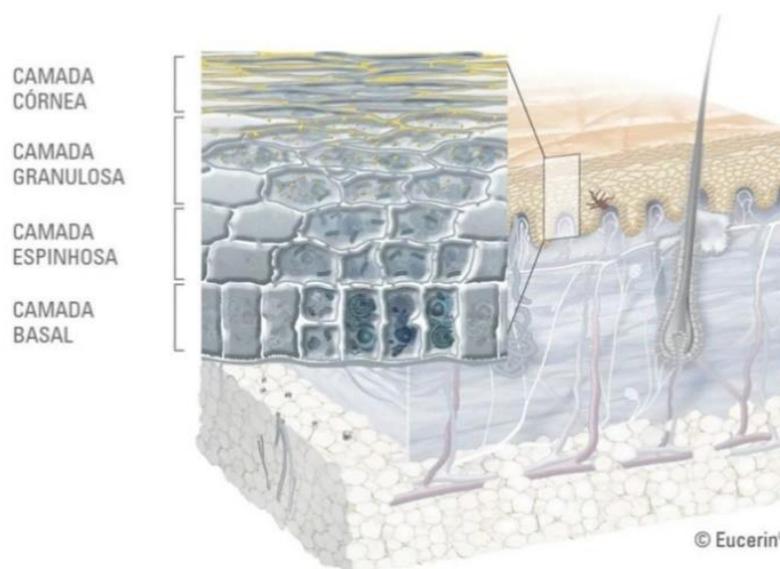
De acordo com Junqueira e Carneiro (2013), a estrutura da pele (FIGURA 7) é dividida em três camadas principais: epiderme, derme e hipoderme (está última não faz parte da estrutura da pele, mas a une com os órgãos subjacentes). A hipoderme compreende a camada mais interna, a derme a camada intermediária e a epiderme a camada mais externa. A epiderme (FIGURA 8) é constituída por células achatadas, queratinizadas, é avascular e é composta por cinco camadas: basal, espinhosa, granulosa, lúcida e córnea (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2013). Na sua forma mais complexa (pele espessa), possui uma quinta camada: a camada lúcida.

Figura 7 – Camadas da pele.



Fonte: adaptado de Eucerin (2021).

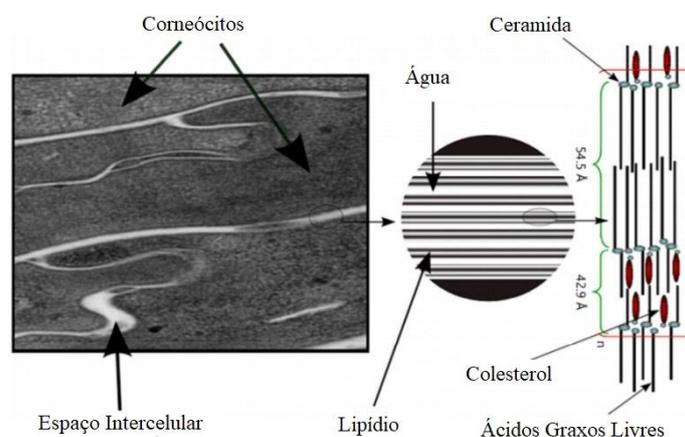
Figura 8 - Camadas da epiderme.



Fonte: Eucerin (2021).

Segundo Bouwstra *et al.* (2000), a principal barreira contra a difusão da maioria das substâncias através da pele se encontra na camada córnea. A estrutura da camada córnea ou estrato córneo apresenta várias fileiras de células achatadas, mortas, sem núcleo nem organelas, com membrana celular bem espessa e citoplasma cheio de queratina (corneócitos). Estas células se encontram envolvidas por uma matriz lipídica existente na forma de bicamadas lipídicas que são formadas principalmente por ceramidas, ácidos graxos livres e colesterol (FIGURA 9).

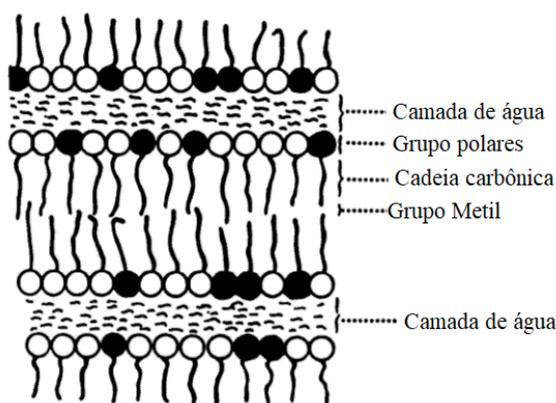
Figura 9 – Representação esquemática da seção transversal da camada córnea.



Fonte: adaptado de Sahle *et al.* (2015).

Os lipídios são organizados de forma a manter suas cadeias hidrofóbicas voltadas para o interior e os grupos hidrofílicos direcionados para o exterior. As bicamadas lipídicas resultantes dessa orientação são paralelas à superfície dos corneócitos. Tal conformação é chamada de “tijolos e cimento” da camada córnea (Figura 10) onde os corneócitos representam os tijolos e o conteúdo lipídico, o cimento (MOUAD; PORTO, 2014). Por isso, qualquer alteração nos lipídios que compõem o estrato córneo pode causar disfunção na barreira da pele (SAHLE *et al.*, 2015).

Figura 10 – Modelo “tijolos e cimento” da camada córnea.



Fonte: adaptado de Friberg, *et al.* (1990).

Os ácidos graxos livres (AGL) encontrados nas bicamadas lipídicas da camada córnea são saturados e possuem um comprimento de cadeia entre C16 e C26. O ácido palmítico (C16:0), ácido esteárico (C18:0), ácido beênico (C22:0), ácido lignocérico (C24:0) e ácido hexacosanóico (C26:0), são os principais AGL da camada córnea. Outros AGL de cadeia insaturada também podem ser encontrados, como os ácidos oleicos (C18:1, n – 9), ácido eicosapentaenóico (C20:5, n – 3), ácido docosahexaenóico (C22:6, n – 3) e LA (C18:2, n – 6) - o ácido graxo poliinsaturado mais abundante - e seus derivados (SAHLE *et al.*, 2015).

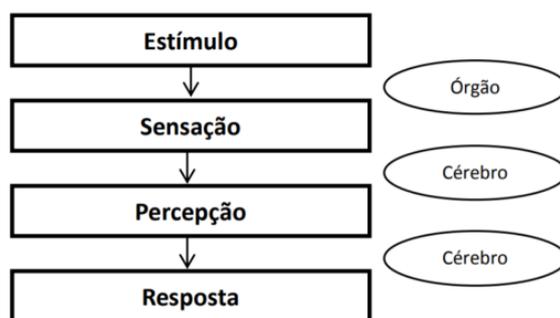
Os emolientes em formulações cosméticas, assim como os lipídeos presentes na pele, conseguem evitar a evaporação da umidade, criando uma fina camada na superfície (MIYAHARA, 2017). Dessa forma, o estudo sobre a pele é alvo de interesse na área dermocosmética e farmacêutica, pois o comportamento do emoliente/produto na pele exerce bastante influência na aceitação sensorial durante e após o uso.

3.3 Análise sensorial de emolientes

Para um produto cosmético ser considerado aceitável pelo consumidor, este deve ter uma aparência adequada e todas as características sensoriais almejadas devem ser alcançadas, além da eficácia prometida (LUKIC *et al.*, 2012). Por isso, os testes sensoriais podem ser aliados importantes no processo de desenvolvimento do produto.

A análise sensorial é descrita como um método científico utilizado na análise, medição e interpretação das reações das características das matérias-primas e produtos na percepção de todos os sentidos humanos (KAORI, 2019). Os testes sensoriais podem ser utilizados para realizar comparações entre amostras, entender a aceitação e preferência de mercado (KAORI, 2019). A Figura 11 exemplifica a cadeia de percepção sensorial.

Figura 11 – Cadeia de percepção sensorial.



Fonte: adaptado de Kaori (2019).

De forma geral, a análise sensorial é executada por um conjunto de pessoas que tem por objetivo analisar os atributos sensoriais do produto. Para isso, é necessário determinar o propósito do estudo, elaborar o método em que este será avaliado e aplicá-lo. Os dados obtidos são então tratados estatisticamente, chegando à uma conclusão sobre os produtos avaliados em questão (TEIXEIRA, 2009).

Segundo Bispo (1999), a análise sensorial pode ser executada em diferentes métodos classificados em: discriminativos, afetivos ou descritivos. O primeiro método consiste em determinar se há diferenças entre duas ou mais amostras, o segundo em dizer qual a preferência e aceitabilidade do consumidor e por fim, o método descritivo que mensura os atributos sensoriais.

Alguns dos atributos sensoriais que podem ser utilizados na indústria de cosméticos estão dispostos na Tabela 3 a seguir:

Tabela 3 – Atributos Sensoriais e Definição.

| Atributo Sensorial | Definição |
|---------------------------|---|
| Ponto de Absorção | Quantidade de rotações para que o produto possa a ser absorvido pela pele |
| Espalhabilidade | Facilidade em espalhar o produto sobre a área delimitada na pele |
| Deslizamento | Facilidade em escorregar o dedo sobre a área delimitada na pele |
| Pegajosidade | Intensidade da impregnação do dedo sobre a área delimitada na pele |
| Filme Aveludado | Percepção de “pele de pêsego” sobre a área delimitada na pele |
| Toque Seco | Percepção na pele de não pegajosidade, não oleosidade e sem brilho |
| Brilho na Pele | Intensidade de luz refletida na área delimitada na pele |
| Oleosidade | Percepção de óleo sobre a área delimitada na pele |
| Filme Gorduroso | Percepção de filme gorduroso sobre a área delimitada na pele |

Fonte: da autora (2021).

Os emolientes possuem um grande papel em como o consumidor perceberá o cosmético na pele, uma vez que atuam como agentes modificadores do sensorial.

3.4 Propriedades físico-químicas relevantes em emolientes

Algumas propriedades físico-químicas como a viscosidade, já possuem correlação com atributos sensoriais que estão parcialmente descritas na literatura, outras permanecem pouco ou não estudadas. As principais são:

Peso Molecular

O peso molecular (PM) ou massa molecular se refere as somas das massas atômicas dos átomos da molécula (CHANG; GOLDSBY, 2013).

Receptores de Ligação de Hidrogênio

Os receptores de ligação de hidrogênio (RLH) são os átomos envolvidos na interação intermolecular de uma ligação de hidrogênio.

log P

O log P se refere ao logarítmico do coeficiente de partição que é definido pela relação de concentrações de uma determinada substância em outros dois solventes. O log P (Equação 1) indica a tendência preferencial de uma substância para se dissolver em um solvente ou em outro (CANTO, 2016).

$$\log P = \frac{[Z] \text{ fase rica em a}}{[Z] \text{ fase rica em b}} \quad (1)$$

onde a e b são diferentes solventes e Z uma determinada substância. O coeficiente de partição octanol/água é frequentemente empregado para caracterizar a lipofilia de uma substância, onde quanto menor o log P, mais lipofóbica é a substância. Por outro lado, quando maior o log P, mais lipofílica é a substância (CLEMENTE, 2011).

Polarizabilidade

A polarizabilidade (POL) pode ser explicada como a resposta de uma molécula, átomos e íons a um campo elétrico ou a uma carga nas suas proximidades (FOTHERINGHAM *et al.*, 2021), ou seja, a facilidade com que ocorre a distorção das nuvens de elétrons. Tal distorção acarreta em um momento dipolo que influencia as forças de dispersão ou forças de dipolo induzido-dipolo induzido de uma substância (COX; REUSSER, 2013).

Segundo Cox e Reusser (2013), os fatores que influenciam a polarizabilidade são:

- Número de elétrons: quanto maior o número de elétrons, menor controle sobre a distribuição de carga, a carga nuclear tem. Portanto, uma maior polarizabilidade é percebida.
- Raios atômicos: quanto maior a distância dos elétrons entre a carga nuclear, menor controle sobre a distribuição de carga, a carga nuclear tem. Portanto, uma maior polarizabilidade é percebida.
- Orientação molecular: salvo moléculas tetraédrica, octaédrica ou icosaédrica, a orientação molecular em relação ao campo elétrico pode afetar a polarizabilidade.

Superfície Polar

A superfície polar (SP), como o nome já diz, é definida como a parte da molécula que é polar. Junto com o logP, tal propriedade é bastante útil na área farmacêutica pois fornece correlações com várias características sobre absorção de drogas no organismo. A informação sobre a superfície polar agrupa informações como polaridade molecular, características de ligação de hidrogênio e solubilidade que influenciam a penetração de substâncias na membrana (ERTL, 2007).

Densidade

A densidade é a razão da massa pelo volume em uma dada temperatura e pressão. Além disso, é uma propriedade intensiva, ou seja, a razão sempre será a mesma para uma determinada substância. A densidade é representada através da Equação 2.

$$d = \frac{m}{V} \quad (2)$$

onde m é a massa, V o volume e d a densidade da substância.

Índice de Refração

Quando a luz passa de um meio para outro, esta sofre um desvio que depende da velocidade nos dois meios em questão. A grandeza física adimensional que mede a redução da velocidade da luz, ao correlacionar as velocidades em dois meios diferentes, é chamada de índice de refração (Equação 3)(YOUNG; FREEDMAN, 2016).

$$n_{21} = \frac{v_1}{v_2} \quad (3)$$

onde v_1 e v_2 são as velocidades nos meios 1 e 2 respectivamente e n_{21} é o índice de refração entre o meio 1 e 2.

Teor de voláteis

A volatilidade pode ser descrita como a tendência de evaporação de uma determinada substância, ou seja, a facilidade em que ocorre a mudança do estado líquido para o gasoso (SOUZA, 2004). Logo, o teor de voláteis é a fração em massa da substância que volatiliza durante o aquecimento de uma amostra padronizada em condições controladas.

As forças intermoleculares, massa molecular e a superfície de contato são alguns dos fatores que exercem influência na volatilidade de uma substância. A intensidade das forças intermoleculares na substância determinará a dificuldade da quebra das ligações, ou seja, forças intermoleculares mais fortes, levam a uma maior atração e conseqüentemente, menor será a evaporação. O contrário também é válido. Sobre a superfície de contato, com uma maior área de contato a mudança da substância do estado líquido para o gasoso é favorecida (VOLATILIDADE QUÍMICA, 2020).

Coefficiente de fricção

O coeficiente de fricção é uma grandeza que mede a quantidade de fricção presente entre duas superfícies (ASHBY; JONES, 2012). O coeficiente de fricção pode ser dado pela Equação 4 (estático) e Equação 5 (cinético):

$$\mu_s = \frac{F_s}{N} \quad (4)$$

$$\mu_k = \frac{F_k}{N} \quad (5)$$

onde μ_s , μ_k , F_s e F_k são o coeficiente de fricção estático, cinético, força estática e força cinética, respectivamente, e N é a força normal. O coeficiente de fricção cinético sempre será menor que o coeficiente de fricção estático ($\mu_s > \mu_k$), pois, uma vez que as superfícies começam a deslizar entre si, a força limitante diminui ligeiramente.

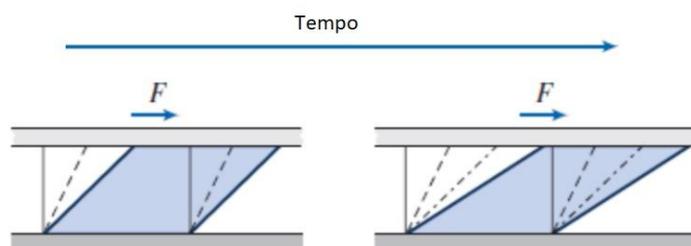
Alguns fatores podem influenciar no valor do coeficiente: superfícies mais ásperas e os valores dos coeficientes dependem das duas superfícies que estão em contato (MALYSHEV, 2014).

Viscosidade

Segundo Çengel e Cimbala (2015), a viscosidade é uma propriedade que representa a resistência interna de um fluido ao movimento e depende das interações

intermoleculares, do tamanho da molécula e do formato da molécula. Como a Figura 12 ilustra, os fluidos são considerados substâncias que se deformam continuamente sob a ação de uma tensão de cisalhamento. Além disso, o fluido não deslizará sobre a superfície estacionária (condição de não deslizamento).

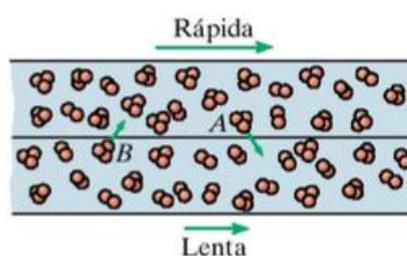
Figura 12 – Comportamento do líquido devido à força de cisalhamento.



Fonte: adaptado de Fox; Mcdonald; Pritchard (2014).

A camada sobre a superfície onde a velocidade é zero desacelera as camadas adjacentes, acarretando diferenças nas velocidades das camadas do fluido. As consequências da condição de não deslizamento explicam a resistência que origina a viscosidade em um fluido: uma vez que as moléculas do fluido estão sempre em movimento (Figura 13), as colisões de moléculas de camadas diferentes, ocasionam a troca de quantidade de movimento, interferindo na mobilidade da molécula (HIBBLER, 2016).

Figura 13 – Camadas de fluido deslizando uma sobre a outra.



Fonte: adaptado de Hibbler (2016).

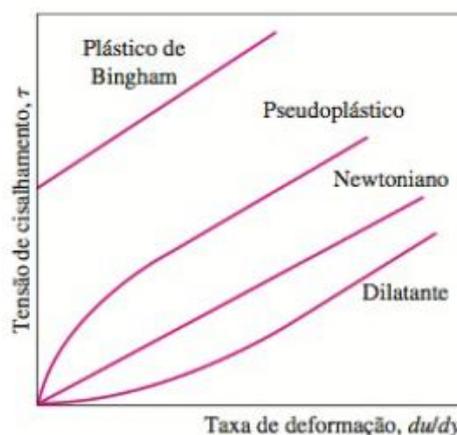
A viscosidade (μ) também varia com a temperatura e tem a sua relação dada pela Lei de Newton da viscosidade (Equação 6):

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad (6)$$

A Equação 6 nos diz que a tensão de cisalhamento (τ) no fluido é diretamente proporcional a taxa de deformação por cisalhamento ou gradiente de velocidade ($\frac{du}{dy}$) (HIBBLER, 2016). Fox (2014) menciona que quando a tensão de cisalhamento é

diretamente proporcional à taxa de deformação, o fluido é considerado newtoniano. Os fluidos que não apresentam tal relação linear, são chamados de fluidos não-newtonianos (plástico de Bingham, pseudoplástico e dilatante). A Figura 14 dispõe os tipos de fluidos em função da taxa de deformação.

Figura 14 – Comportamento reológico dos fluidos em função da taxa de deformação.



Fonte: adaptado de Çengel e Cimbala (2015).

- Fluido pseudoplástico: são fluidos onde a viscosidade diminui à medida que a taxa de deformação aumenta;
- Fluido dilatante: são fluidos onde a viscosidade aumenta à medida que a taxa de deformação diminui;
- Plástico de Bingham ou plástico ideal: fluido que comporta como um sólido até que uma certa tensão seja alcançada, para então apresentar uma relação linear entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação (FOX; MCDONALD; PRITCHARD, 2014).

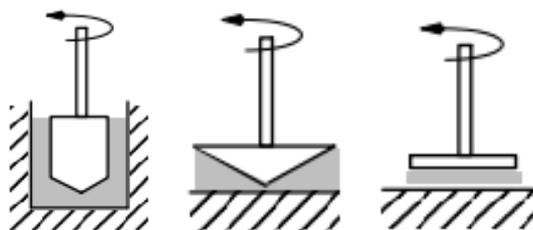
As viscosidades das substâncias podem ser medidas através de viscosímetros simples ou até mesmo em equipamentos mais sofisticados como o reômetro. É o tipo de fluido e o estudo que se deseja fazer que determinará qual equipamento e metodologia será utilizada.

Os viscosímetros são equipamentos mais simples e não possuem a capacidade de fornecer a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação. É possível obter somente o valor da viscosidade. Exemplos: viscosímetro de Brookfield e viscosímetro de Orifício ou Copo Ford.

Os reômetros são equipamentos mais robustos que permitem conhecer a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação de uma substância. Duas situações podem ser exploradas em um reômetro: a primeira é controlar o torque (tensão de cisalhamento) e medir o deslocamento angular (taxa de deformação por cisalhamento) e a outra é controlar o deslocamento angular e medir o torque. Para isso, o reômetro funciona com geometrias (cilindros, cone e placas) que confinam o fluido, permitindo a realização dos experimentos (FONTANA, 2018), como pode ser visto na Figura 15. O tipo de geometria utilizado dependerá da faixa de viscosidade, do tipo de fluido e da deformação.

A viscosidade pode ser obtida através de ensaios da curva de fluxo, onde se investiga a relação entre faixas de tensão de cisalhamento e a respectiva taxa de deformação.

Figura 15 – Tipos de geometrias utilizadas em reômetros, em sequência: geometria de cilindros concêntricos, cone-placa e placas paralelas.



Fonte: adaptada de Réginer, Périus e Carmo (2020).

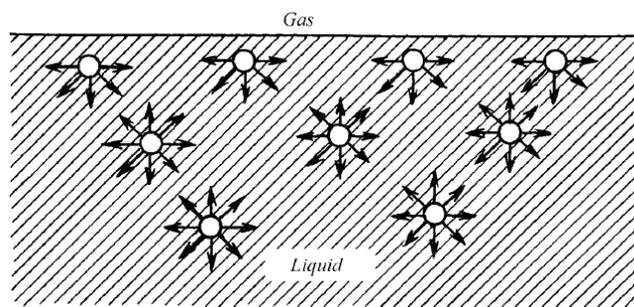
Tensão Superficial e Interfacial

A tensão superficial e a interfacial são um efeito físico que acontece na interface entre duas fases. Exceto quando uma dessas fases é gasosa, o efeito é denominado de tensão superficial, caso ao contrário, é denominado de tensão interfacial (líquido-líquido: dois líquidos imiscíveis).

A Figura 16 ilustra o comportamento das moléculas de um líquido frente a uma interface com gás. As moléculas dos líquidos estão em constante movimento e possuem forças de interação molecular entre elas. No entanto, a resultante vetorial de tais forças em cada molécula é diferente na interface, desencadeando um desequilíbrio nas forças

atrativas. A força resultante das moléculas do meio é nula (são atraídas pelas outras moléculas igualmente em todas as direções), enquanto as moléculas na superfície são atraídas somente por moléculas abaixo e ao lado delas e, portanto, a força resultante não é nula (SINAISKI; LAPIGA, 2007).

Figura 16 – Interface gás-líquido.



Fonte: adaptado de Sinaiski e Lapiga (2007).

Conseqüentemente, as moléculas na superfície sofrem uma força de tração, causando o efeito de “membrana elástica” na camada superficial do líquido (SINAISKI; LAPIGA, 2007). Logo, é possível dizer que a tensão superficial é igual a intensidade desta força de tração. Matematicamente, a tensão superficial pode ser explicada como o trabalho de estiramento necessário para expandir a área da superfície do líquido uma unidade (ÇENGEL; CIMBALA, 2015).

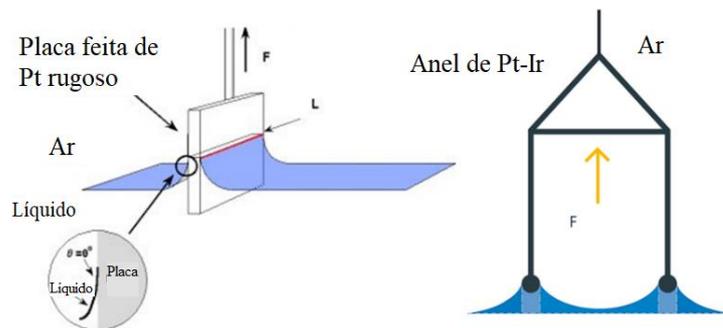
A Equação 7 expressa a relação da tensão superficial:

$$\gamma_s = \frac{F}{A} \quad (7)$$

onde γ_s é a tensão superficial, F a força aplicada no sentido oposto para equilibrar o efeito de tração e A a área.

Para a medição da tensão superficial e interfacial, existem diferentes métodos baseados nas forças de equilíbrio de uma determinada geometria em contato com a interface do sistema. Os métodos mais comumente utilizados são o método do anel de du Noüy e o das placas de Método das Placas de Wilhelmy (FIGURA 17).

Figura 17 – Métodos para a obtenção das tensões superficiais e interfaciais (Método das Placas de Wilhelm e método do anel de du Nouÿ, respectivamente).



Fonte: adaptado de Braseq (2021).

O método de Wilhelmy Plate (placas de Wilhelmy) conta com uma placa de platina retangular com as dimensões conhecidas que sofre torção dentro do líquido e a força contrária gerada pelo líquido à placa é diretamente proporcional a tensão superficial ou interfacial (Equação 8). A força é mensurada com o auxílio de uma balança acoplada na geometria. Já o método de Du Nouy Ring é fundamentado na força que se faz necessária para retirar do líquido um anel de platina-irídio de raio (r) em contato com a superfície deste. Essa força também é mensurada como o auxílio de uma balança (BRASEQ, 2021) e é utilizada para calcular a tensão superficial e/ou interfacial (Equação 9).

$$\gamma_s = \frac{F}{L \cos\theta} \quad (8)$$

$$\gamma_s = \frac{F}{4\pi r} \quad (9)$$

onde L é o comprimento da placa, θ o ângulo entre a placa e a superfície do líquido sobre ela e r o raio do anel.

3.5 Quimiometria

A quimiometria é baseada na matemática, estatística e computação, mas, continua sendo uma área da química. Tal área surgiu pela necessidade de tratar e extrair o máximo de informações relevantes dos dados químicos obtidos por experimentos (FERREIRA *et al.*, 1999).

A calibração multivariada está entre os métodos quimiométricos mais empregados atualmente na área de química analítica. Este método permite a construção de modelos matemáticos através de variáveis descritivas (independentes) para se determinar outra variável (variável resposta ou dependente). Por exemplo, a calibração multivariada relaciona dados de saída de um instrumento às concentrações dos analitos e/ou entre outras propriedades (SIMÕES, 2008). O método de calibração multivariada possui quatro etapas:

- Pré-processamento: o pré-processamento pode ser necessário uma vez que os dados obtidos das amostras apresentem uma má distribuição, causando dificuldades na extração de informações ou até mesmo na interpretação dos dados;
- Calibração: os modelos matemáticos são estabelecidos através da criação de um algoritmo que tem o objetivo de obter a variável resposta (Y) de interesse a partir de variáveis descritivas (X), ou seja, determinar uma relação matemática entre X e Y (FERREIRA *et al.*, 1999);
- Validação: os modelos criados na parte anterior são analisados através das ferramentas de diagnóstico. As validações mais utilizadas são a randomização de Y e a validação cruzada. A validação por randomização de Y possui o objetivo de provar que as variáveis descritivas e as variáveis respostas estão de fato estatisticamente correlacionadas. O teste consiste em embaralhar várias vezes a o vetor y e manter a matriz X fixa. Já a validação cruzada permite avaliar a preditividade interna do modelo. Neste teste, uma amostra por vez é eliminada do grupo de calibração; em seguida, o modelo é construído novamente e testado com a amostra eliminada. Este tipo de validação cruzada é chamado de *leave-one-out* (LOO). Caso um conjunto de amostras seja eliminado por vez, a validação é chamada de *leave-many-out* (LMO) ou *leave-N-out* (KIRALJ; FERREIRA, 2009);

- Previsão: após os modelos serem analisados e validados, são aplicados para realizar a predição da variável resposta desejada em outras amostras, ou grupo teste (SIMÕES, 2008).

Além das quatro etapas citadas, a realização da análise de componentes principais (PCA) anteriormente a criação dos modelos também pode ser útil, uma vez que manipula os dados originais para apresentá-los em um número menor de fatores, facilitando a interpretação (FERREIRA et al., 1999). Cada fator ou componente principal (PC) é uma combinação linear de todas as variáveis originais e não são dependentes entre si (VARELLA, 2008). A PCA consegue verificar quais variáveis estão contribuindo da mesma forma (correlacionadas) ou não, dizer se uma amostra é distinta da outra, apontar quais variáveis influenciam mais para estas diferenças, detectar padrão de amostras e distinguir informações úteis de ruídos.

Os modelos matemáticos originados na etapa de calibração podem ser obtidos por diferentes métodos de regressão. Os métodos mais aplicados na construção de modelos lineares são a Regressão Linear Múltipla (MLR) e a Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS) (SIMÕES, 2008). A Análise Discriminante Linear (LDA) também pode ser útil, uma vez que investiga relações entre uma variável não métrica (categoria) e duas ou mais variáveis métricas (PROTIL; SILVA, 2006).

Aliando a quimiometria aos dados físico-químicos e sensoriais de emolientes, permite-se a criação de modelos matemáticos que forneçam as predições de atributos sensoriais. Os modelos obtidos podem ser excelentes ferramentas para diminuir a subjetividade do processo de formulação cosmética, pois apresentam uma previsão de como um determinado emoliente irá se comportar na pele sensorialmente falando.

3.5.1 Regressão linear múltipla (MLR)

A MLR é empregada quando precisamos estudar a relação entre mais de duas variáveis (onde duas ou mais variáveis podem ser independentes), diferindo da regressão linear simples, que é utilizada na análise da dependência de somente duas variáveis (uma dependente e a outra independente) (PEREIRA; MANOSSO; FOSSATI, 2019).

Na criação do MLR, cada variável explicativa y , ou seja, cada vetor y da matriz Y é expressa como uma combinação linear das variáveis descritivas da matriz X e um vetor b (vetor que possui os coeficientes de regressão), como a Equação 10 mostra:

$$Y = Xb + e \quad (10)$$

onde e é o vetor resíduos.

Inicialmente, as variáveis a serem estudadas devem ser definidas baseadas em pesquisas teóricas, onde as relações de causa e efeito entre as variáveis descritivas e explicativas já foram investigadas. A partir daí, é necessário plotar gráficos de dispersão para cada uma das relações entre x e y , para entender se realmente há correlação entre as variáveis escolhidas. Para facilitar a investigação dos gráficos, uma linha de tendência pode ser criada (PEREIRA; MANOSSO; FOSSATI, 2019). Além disso, é necessário checar se existe alta correlação entre as variáveis para reduzir complicações de multicolinearidade no modelo (SIMÕES, 2008) (a confirmação também pode ser realizada na etapa descrita anteriormente e em conjunto com a análise dos gráficos da PCA). Uma limitação encontrada na MLR se dá por conta de o modelo ser baseado na resolução de um sistema de equações lineares simultâneas, portanto, o número de amostras deve ser o mesmo ou maior do que o número de variáveis.

3.5.2 Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)

Nos casos em que o número de observações é menor do que a quantidade de variáveis, o método de PLS se torna uma alternativa. Além disso, tal método possui a vantagem de não ser afetado pela multicolinearidade (MORELLATO, 2010).

A PLS emprega ambas as informações da matriz X quanto da matriz Y . Assim como na MLR, a PLS pode ser expressa pela Equação 10. Em relação aos erros, em ambos os modelos, as suposições são similares, exceto pela distribuição (abordagem livre de distribuição) (MORELLATO, 2010). As matrizes são então divididas ao mesmo tempo num produto de duas matrizes de “scores” e “loadings”. Por fim, as novas matrizes “scores” são relacionadas linearmente entre si, dando origem ao modelo PLS (SIMÕES, 2008).

3.5.3 Análise Discriminante Linear (LDA)

O método LDA geralmente é utilizado para classificar, controlar a qualidade, explorar (PONTES, 2009) e reduzir a dimensionalidade de um grupo de dados (FERNANDES; BALA, 2013). A LDA é fundamentada em definir funções discriminantes lineares as quais aumentam a variância entre as categorias e diminuem a variância dentro de cada categoria (BRUNS; FAIGLE, 1984). Com estabelecimento de um modelo LDA com resultados aceitáveis, é possível concluir que existe uma distinção mensurável e maximizada entre as classes de dados. A combinação linear obtida como resultado pode ser utilizada como um classificador (REZENDE; FILHO; VIEIRA, 2019), ou seja, será possível prever qual categoria a amostra externa faz parte (COSTA *et al.*, 2007). Apesar de a LDA ser um método simples de classificação, a linearidade de tal análise pode não ser adequada para todos os casos (SILVA; MACEDO, 2021).

3.6 Predição de atributos sensoriais de emolientes por medidas indiretas

Os emolientes são ingredientes que cumprem um papel importante nas características sensoriais do produto cosmético final. São peças-chaves que influenciam como o consumidor perceberá o produto cosmético em sua pele e/ou cabelo. Em geral, são poucas as referências bibliográficas sobre avaliação sensorial de cosméticos e, particularmente, de emolientes. Além disso, existem ainda menos trabalhos que correlacionem as propriedades físico-químicas de emolientes com dados sensoriais.

Masaki e Totani (1998), conseguiram demonstrar uma correlação linear negativa (com o coeficiente de correlação igual a -0,758) entre o coeficiente de fricção e o atributo sensorial “suavidade” utilizando cinco emolientes entre ésteres e silicones. A suavidade foi mensurada por cinco painelistas que espalharam o emoliente em uma determinada área durante cinco voltas com os dedos e após trinta minutos, avaliaram a suavidade na pele.

Parente, Gámbaro e Solana (2005), investigaram oito emolientes líquidos (óleo mineral, óleo de girassol, esqualano, oleato de decila, miristato de isopropila, octildodecanol, dimeticona e ciclometicone) para determinar a relação entre as medidas sensoriais e instrumentais. Na análise sensorial foram avaliados os seguintes atributos:

dificuldade de espalhamento, brilho, resíduo, pegajosidade, escorregamento, maciez e oleosidade. As propriedades físico-químicas medidas foram a espalhabilidade, viscosidade e tensão superficial. Os dados coletados foram então analisados estatisticamente por Análise de Variância (ANOVA), Análise de Componentes Principais (PCA) e Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS). A PLS revelou que os atributos sensoriais dos emolientes podem ser bem previstos por medidas instrumentais. Brilho, resíduo e oleosidade foram correlacionados com a tensão superficial e espalhabilidade, enquanto a viscosidade instrumental foi correlacionada com a dificuldade de espalhamento, pegajosidade, maciez e escorregamento.

Savary, Grisel e Picard (2013), investigaram o impacto dos emolientes nas propriedades de espalhabilidade de produtos cosméticos combinando a análise sensorial e a instrumental. No estudo, quatro emolientes (tetraetilhexanoato de pentaeritritila, dipentaeritritila pentaiononanoato, dicaprilato de propanodiol e ciclopentasiloxano) foram incorporados separadamente em uma fase oleosa e em diferentes emulsões óleo em água. A caracterização do espalhamento nas fases oleosas foi realizada através do ângulo de contato de uma gota de solução em deposição na superfície plana de polimetilmetacrilato (PMMA). O procedimento sensorial foi baseado no espalhamento espontâneo das fases oleosas na pele. Com relação às emulsões, os resultados revelaram uma correlação clara entre a avaliação de espalhamento in vivo e os parâmetros do coeficiente de atrito medidos pelo texturômetro. Os autores conseguiram estabelecer uma boa correlação entre a análise sensorial in vivo e as medidas instrumentais de óleos e emulsões, prometendo assim o possível desenvolvimento de ferramentas preditivas para avaliar a espalhabilidade.

Miyahara (2017), mostrou que hidrocarbonetos possuem uma correlação negativa entre a espalhabilidade e seu peso molecular. Entretanto, os óleos de silicone se comportam de forma diferente, uma vez que as ligações Si-O permitem uma maior espalhabilidade na pele mesmo com altos pesos moleculares.

Em 2017, Douguet *et al.*, estudaram o impacto das propriedades estruturais e físico-químicas dos emolientes em sua espalhabilidade. Os emolientes classificados como ésteres, silicones, óleos vegetais e minerais, foram analisados totalizando cinquenta e três amostras. As propriedades físico-químicas medidas foram a viscosidade, tensão superficial, densidade e espalhabilidade. Dois métodos diferentes foram utilizados para caracterizar a espalhabilidade: o ângulo de contato e valor da espalhabilidade. Além disso,

um substituto artificial da pele foi usado como substrato poroso artificial para medir a espalhabilidade. A regressão por PLS dos dados físico-químicos e do valor de espalhamento revelou que a viscosidade tem um grande impacto no comportamento de espalhamento dos emolientes, seja qual for o seu tipo químico. A análise estatística permitiu o desenvolvimento de modelos preditivos confiáveis como uma ferramenta poderosa para os formuladores preverem a espalhabilidade de emolientes.

Chao *et al.* (2018), investigaram a relação das propriedades físico-químicas de treze emolientes com seus respectivos atributos sensoriais. Os emolientes investigados foram três hidrocarbonetos, seis ésteres, um éter, um silicone e duas misturas éster/hidrocarboneto. O estudo analisou a viscosidade, densidade, índice de refração, volatilidade, ângulo de contato, tensão superficial e duas propriedades de superfície secundária deduzidas da tensão superficial: componente polar e dispersiva, como propriedades físico-químicas. Na análise de dados foi usado a PCA para as propriedades físico-químicas, a Análise de Agrupamento Hierárquico (HCA) para descobrir como os emolientes poderiam ser agrupados de acordo com suas propriedades físico-químicas e o Mosaic Plots para os dados sensoriais. Com o resultado obtido no trabalho, foi possível estabelecer uma base para prever a espalhabilidade de emolientes correlacionando com coeficiente de espalhamento no Teflon®, uma quantidade físico-química que combina a tensão superficial ao cosseno do ângulo de contato.

Em 2018, Parente, Gámbaro e Ares , realizaram a ANOVA nas propriedades sensoriais de oito emolientes (dimeticona, ciclometicona, miristato de isopropila, octildodecanol, óleo de emú, óleo de ñandú e dois produtos obtidos por fracionamento térmico de óleo de ñandú - estearina e oleína). Na análise sensorial foram avaliados os atributos: dificuldade de espalhamento, brilho, resíduo, pegajosidade e oleosidade. A PCA dos atributos sensoriais avaliados foi usada para ilustrar a relação entre as variáveis e as amostras. Os emolientes puderam ser então caracterizados como secos, protetores e gordurosos.

Berkey *et al.* (2020), foram capazes de fornecer uma nova base racional para a escolha do emoliente e seus efeitos nas propriedades biomecânicas que afetam a função de barreira do estrato córneo (EC) e conseqüentemente, na percepção do consumidor. O estudo envolveu quatorze emolientes (carbonato de dipropilheptilo, octiloctanoato, adipato de dibutila, 2-etilhexil benzoato, isononil isononanoato, hexildecanol, éter 2-propilheptilo, pentadecano e heptadecano, carbonato de dicaprilil, éter dicaprilíco,

propilheptil caprilato, óleo erucato, triglicérido caprílico e glicerol). O trabalho demonstrou que os emolientes podem reduzir o estresse mecânico do EC e o peso molecular, a difusividade do estrato córneo, área de superfície polar e a viscosidade são preditivos dessa capacidade.

Bom *et al.* (2021), estudaram a correlação das propriedades físico-químicas, com a espalhabilidade sensorial para alternativas sustentáveis ao uso de petrolatos e dimeticones através da análise multivariada MLR. Os autores encontraram modelos de predição satisfatórios para espalhabilidade com os parâmetros viscosidade, densidade e temperatura média de fusão (para o modelo petrolato).

4 METODOLOGIA

A metodologia do presente trabalho pode ser distribuída em três partes: análise sensorial, obtenção dos dados instrumentais e teóricos, e por fim, a análise estatística.

4.1 Análise Sensorial

A análise sensorial foi realizada para obter a descrição quantitativa de 23 matérias-primas emolientes (TABELA 4) através de Painel Treinado.

Tabela 4 – Emolientes analisados no Painel Treinado.

| Nomenclatura INCI | Classificação |
|--|--------------------------------|
| Óleo de Canola (CO) | Óleo vegetal |
| Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT) | Triglicerídeo |
| Ciclopentasiloxano (C) | Silicone |
| Ciclopentasiloxano (e) Dimeticonol (CD) | Silicone |
| Decano (e) Dodecano (DD) | Alcano |
| Decil Oleato (DO) | Éster |
| Éter Dicaprílico (DE) | Éter |
| Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350) | Éster/ácido graxo |
| Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50) | Éster/ácido graxo |
| Malato de Diisostearil (DM) | Éster |
| Dimeticona 350 (D350) | Silicone |
| Dimeticona 50 (D50) | Silicone |
| Oleato de Etila (EO) | Éster |
| Óleo de Girassol (HO) | Óleo vegetal |
| Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC) | Éster/álcool graxo/ácido graxo |
| Laurato de isoamila (IL) | Éster |
| Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD) | Éster |
| Isonanoato de isononila (II) | Éster |
| Miristato de isopropila (IM) | Éster |
| Palmitato de isopropila (IP) | Éster |
| Octildodecanol (O) | Álcool Graxo |
| Caprilato de propilheptilo (PC) | Éster |
| Citrato de triisostearil (TC) | Éster |

Fonte: da autora (2021).

As avaliações foram conduzidas em cabines sensoriais com 14 avaliadores treinados. Nas cabines sensoriais, a temperatura e umidade foram observadas e controladas durante todo o estudo. As amostras de emolientes foram aplicadas direto nos braços dos avaliadores na quantidade de 25 μ l com uma pipeta automática em um local delimitado.

A Tabela 5 dispõe dos atributos e metodologia de avaliação dos aspectos sensoriais analisados no presente trabalho.

Tabela 5 – Atributos Sensoriais e Método de Avaliação.

(continua).

| Atributo | Método de Avaliação |
|------------------------------|---|
| Ponto de Absorção (PA) | O produto foi aplicado no local delimitado e foi contabilizado o número de rotações necessárias para o produto começar a ser absorvido pela pele. |
| Espalhabilidade (E) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Durante o processo, a facilidade de espalhar o produto foi avaliada. |
| Deslizamento (D) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Logo depois, a facilidade em escorregar o dedo sobre a pele foi avaliada. |
| Pegajosidade (P) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Depois de 1 minuto, o dorso dos dedos indicador e médio foram pressionados contra o local. |
| Filme Aveludado (FA) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Depois de 2 minutos, os dedos foram deslizados gentilmente sobre o local delimitado. |
| Toque Seco (TS) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Depois de 2 minutos, o brilho da pele, a oleosidade com os dedos indicador ou médio e a pegajosidade com o dorso dos dedos, foram avaliados. |
| Brilho na Pele Imediato (BI) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Imediatamente, o braço foi erguido contraluz e avaliado. |
| Brilho na Pele Residual (BR) | Após 2 minutos da aplicação do produto no local delimitado, a avaliação para o brilho na pele foi realizada novamente. |

Tabela 5 – Atributos Sensoriais e Método de Avaliação.

(conclusão).

| Atributo | Método de Avaliação |
|--------------------------------|--|
| Oleosidade Imediata (OI) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Imediatamente, os dedos foram passados sobre o local e entre si. A intensidade da oleosidade foi avaliada. |
| Oleosidade Residual (OR) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Após 2 minutos, os dedos foram passados sobre o local e entre si. A intensidade da oleosidade foi avaliada. |
| Filme Gorduroso Imediato (FGI) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Imediatamente, o dedo indicador ou médio foi deslizado sobre o local. |
| Filme Gorduroso Residual (FGR) | O produto foi aplicado no local delimitado e 15 rotações foram feitas. Após 2 minutos, o dedo indicador ou médio foi deslizado sobre o local. |

Fonte: da autora (2021).

Cada atributo avaliado, exceto o Ponto de Absorção, foi quantificado em escala linear não estruturada de 10 cm ancorada em pouco/meio/muito de acordo com as referências quantitativas para cada atributo. Para o atributo Ponto de Absorção, foi registrado o número de rotações necessárias para que o produto começasse a ser absorvido pela pele. Após as avaliações, o cálculo das médias e desvio padrão para cada atributo foi realizado.

4.2 Dados Teóricos e Experimentais

4.2.1 Dados Teóricos

Dentre os 23 emolientes estudados, 13 emolientes que não são misturas, ou seja, componentes moleculares, tiveram sua notação química SMILES (*Simplified Molecular Input Line Entry System*) como *input* no *software* o ACD/ChemSketch® (disponível em: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>). Feito isso, foi possível calcular as propriedades das moléculas como peso molecular, tensão superficial,

polarizabilidade e o log P, utilizando a ferramenta “calculate” da versão gratuita do software. Apenas o número de receptores de ligação de hidrogênio e a superfície polar foram obtidos através do banco de dados online ChemSpider (disponível em: <http://www.chemspider.com/>).

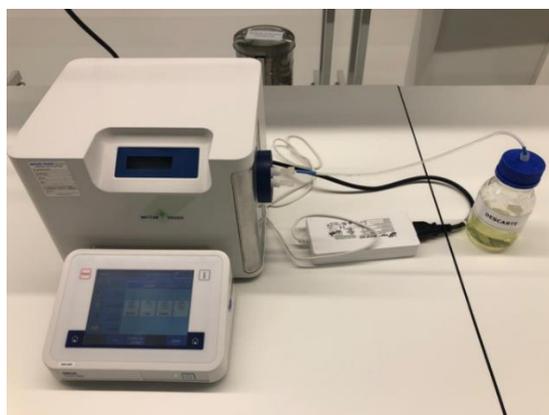
4.2.2 Dados Instrumentais

Os procedimentos experimentais foram realizados em conjunto com a Natura Cosméticos S/A. Maiores detalhes sobre os materiais utilizados e procedimento experimental se encontram no Apêndice A.

Densidade

O procedimento experimental para determinar a densidade dos emolientes foi realizado por um densímetro digital da marca Metler Toledo DMA48 (FIGURA 18), a 25°C.

Figura 18 – Densímetro Digital.

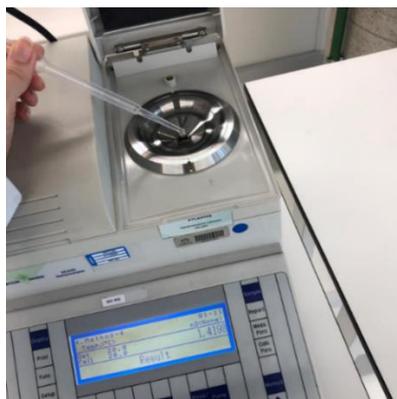


Fonte: da autora (2021).

Índice de Refração

O índice de refração dos emolientes foi determinado utilizando um refratômetro, sendo os experimentos conduzidos digital da marca Metler Toledo, modelo RED40D (FIGURA 19), sendo os experimentos conduzidos a 20°C.

Figura 19 - Refratômetro Digital.



Fonte: da autora (2021).

Teor de voláteis

O procedimento experimental para determinar teor de voláteis de emolientes foi realizado segundo o princípio gravimétrico, ou seja, onde o teor de umidade é baseado na perda de massa de uma amostra dessecada por aquecimento. O equipamento utilizado foi a balança de umidade da marca Metler Toledo, modelo H38 Halogen (FIGURA 20). A amostra foi aquecida até a temperatura de 40°C e mantida durante o tempo de análise pré-selecionado de 3 minutos.

Figura 20 - Balança de umidade.



Fonte: da autora (2021).

Coefficiente de fricção

O procedimento experimental para determinar o coeficiente de fricção dos emolientes foi realizado em um reômetro Híbrido Discovery modelo HR20 da marca TA Instruments com a geometria de quatro bolas (FIGURA 21) e força axial igual a 2 N.

Figura 21 – Geometria Peltier Plate Tribo (4 bolas).



Fonte: da autora (2021).

Viscosidade

A viscosidade foi determinada em ensaios de curva de fluxo, utilizando a faixa de tensão de cisalhamento de 0 a 200 s^{-1} e com a geometria de placas paralelas (50 mm de diâmetro). As medidas foram realizadas em um reômetro Híbrido Discovery, modelo HR-3 da marca TA Instruments (FIGURA 22).

Figura 22 – Reômetro.



Fonte: da autora (2021).

Tensão Superficial e Interfacial

Os ensaios foram realizados em um tensiômetro digital (FIGURA 23) e através do método Placa de Wilhelmy. No caso dos ensaios para a tensão interfacial, a água foi utilizada como segunda fase.

Figura 23 – Tensiômetro.



Fonte: Dataphysics (2020).

4.3 Análise Estatística

As análises foram realizadas de forma separada em dois grupos de emolientes com número de amostras (n) diferentes:

- Grupo I (n=13): emolientes “puros” que permitiram o desenho de suas moléculas no ACD/Chemsketch e posterior cálculo de suas propriedades;
- Grupo II (n=20): emolientes puros e misturas contendo somente dados de propriedades obtidas experimentalmente.

Tanto as propriedades sensoriais, aqui chamadas de variáveis respostas (y) quanto as propriedades físico-químicas ou variáveis descritivas (x) de ambos os grupos, foram tratadas nas seguintes etapas: estatística descritiva, regressão linear, PCA, MLR e LDA. Nas três últimas etapas, o software gratuito Chemoface (NUNES et al., 2012) foi utilizado por oferecer uma interface amigável e acessível.

Estatística descritiva

Foi determinada a média e o desvio padrão dos dados obtidos em duplicata.

Regressão linear

Primeiramente, os conjuntos de dados x e y foram testados realizando uma simples correlação linear para verificar se existia uma relação diretamente linear entre cada

conjunto de propriedades sensoriais e físico-químicas. Para essa etapa utilizou-se o programa Excel e a função “=CORREL”. Posteriormente, as relações com alto valores de coeficiente de Pearson foram plotadas em gráficos de dispersão para checar as prováveis correlações. Da mesma forma, a existência de correlação entre todos conjuntos x-x possíveis foi verificada, mas com o intuito de esclarecer quais variáveis independentes deveriam permanecer na criação dos modelos MLR.

PCA

A PCA, com o pré-processamento autoescalar foi executada no Chemoface para a variável independente, como forma de complementar a informação da etapa anterior sobre as variáveis correlacionadas. Os gráficos contendo os valores de porcentagem de variância para cada PC e a contribuição de cada variável original exercida sobre uma PC (*loading*), foram avaliados e interpretados para tal finalidade.

MLR

O desenvolvimento dos modelos MLR não contou com nenhum tipo de pré-processamento, mas a etapa preliminar de seleção de amostras que compõem o grupo teste foi realizada por seleção manual. Para tal finalidade, 20% das amostras foram selecionadas de forma que representassem mais fielmente o conjunto de dados (valores máximos, mínimos e médios). Para o grupo I, onde $n=13$, 3 amostras foram utilizadas no grupo teste e para o grupo II, onde $n=20$, 4 amostras foram utilizadas para o grupo teste. As amostras do grupo teste servem para testar a capacidade preditiva do modelo e não são utilizadas na etapa calibração. Feito isso, as etapas descritas na seção 3.5 tiveram seguimento para cada grupo:

- Calibração: todas as amostras, em exceção as selecionadas para o grupo teste, foram usadas na calibração. A performance da calibração foi analisada através da raiz do erro quadrático médio da calibração ($RMSE_C$) e do coeficiente de correlação da calibração (R^2_{cal});
- Validação: os modelos foram avaliados pela validação cruzada leave-one-out (LOO) e pelo teste de randomização de y. Além disso, os parâmetros raiz do erro quadrático médio da validação cruzada ($RMSE_{CV}$), o coeficiente de

correlação da validação cruzada (R^2_{CV}), raiz do erro quadrático médio do teste randomização de y ($RMSE_{Y\text{-rand}}$), o coeficiente de correlação do teste randomização de y ($R^2_{Y\text{-rand}}$) e o coeficiente de correlação $R^2_{p\text{-}Y\text{-rand}}$, um parâmetro que penaliza o modelo pela diferença entre $R^2_{Y\text{-rand}}$ e R^2_{cal} , também foram calculados (PRATIM ROY *et al.*, 2009);

- Predição: os modelos foram testados usando as amostras do grupo teste (validação externa) selecionadas previamente. A capacidade preditiva do modelo foi avaliada através da raiz do erro quadrático médio de predição ($RMSE_P$) e do coeficiente de correlação de predição externa (R^2_{pred}). Segundo Pratim roy *et al.* (2009), o R^2_{pred} pode não ser o suficiente para analisar adequadamente a predição externa, por depender do valor da média do grupo de teste. Por isso, o R^2 modificado (R^2_m), um parâmetro que dá a importância para a diferença entre r^2 (o quadrado do coeficiente de correlação entre os valores medidos e preditos) e r^2_0 (o quadrado do coeficiente de correlação entre os valores medidos e preditos com interseção no eixo zero) também foi levado em consideração na análise.

Em relação às faixas para os coeficientes de correlação, modelos com $R^2 > 0,8$ para calibração e $> 0,5$ para validação e teste, além de valores de RMSE e R^2 não bons para o teste de randomização de y (Kiralj & Ferreira, 2009; Tropsha, 2010) são vistos como válidos. Chirico e Gramatica (2011), indicam valores de $R^2 > 0,7$ para calibração e $> 0,6$ para validação e teste.

LDA

Para o desenvolvimento dos modelos LDA, primeiramente, realizou-se a classificação de todas as propriedades em categorias 1, 2 e 3. Os números indicam respectivamente valores baixos, médios e altos. Em seguida, o desenvolvimento do modelo classificatório prosseguiu da mesma forma que modelagem MLR, com exceção da verificação dos parâmetros. Para entender melhor os resultados do modelo, as porcentagens de acertos da calibração, randomização de y , validação cruzada e de predição foram avaliadas.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As médias da intensidade dos atributos sensoriais obtidos através do painel treinado estão dispostos na Tabela 6 e os respectivos desvios padrão no apêndice B.

Tabela 6 – Resultado das Intensidades Médias dos atributos sensoriais.

| Emolientes | Intensidade Média (cm) dos atributos sensoriais | | | | | | | | | | | |
|----------------|---|------|------|-------|------|------|-------|------|------|-------|------|-------|
| | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
| IP | 9,97 | 9,97 | 0,03 | 5,45 | 0,35 | 9,97 | 9,95 | 9,96 | 9,77 | 0,04 | 0,03 | 34,00 |
| DE | 9,97 | 9,97 | 0,03 | 5,39 | 0,58 | 9,97 | 9,88 | 9,96 | 9,7 | 0,03 | 0,03 | 37,00 |
| II | 9,97 | 9,96 | 0,03 | 5,28 | 0,64 | 9,96 | 9,83 | 9,96 | 9,95 | 0,03 | 0,04 | 34,00 |
| PC | 9,97 | 9,96 | 0,03 | 5,34 | 0,71 | 9,96 | 9,92 | 9,96 | 9,87 | 0,03 | 0,03 | 35,00 |
| CCT | 9,97 | 9,96 | 0,03 | 5,93 | 0,59 | 9,97 | 9,91 | 9,97 | 9,96 | 0,04 | 0,04 | 29,00 |
| O | 9,97 | 9,96 | 0,03 | 5,68 | 0,28 | 9,97 | 9,94 | 9,96 | 9,96 | 0,04 | 0,03 | 23,00 |
| CO | 9,96 | 9,95 | 0,04 | 5,79 | 0,66 | 9,97 | 9,95 | 9,96 | 9,96 | 0,04 | 0,04 | 22,50 |
| HO | 9,81 | 9,75 | 0,03 | 5,595 | 0,43 | 9,97 | 9,94 | 9,97 | 9,96 | 0,04 | 0,04 | 21,00 |
| DM | 0,06 | 0,05 | 9,94 | 0,04 | 0,03 | 9,46 | 9,04 | 1,27 | 1,05 | 2,05 | 1,86 | 3,00 |
| TC | 0,04 | 0,04 | 9,96 | 0,04 | 0,04 | 8,99 | 8,37 | 1,12 | 0,88 | 1,65 | 1,23 | 3,00 |
| C | 9,9 | 9,91 | 0,02 | 4,31 | 0,43 | 9,88 | 8,49 | 8,83 | 7,26 | 0,02 | 0,01 | 29,00 |
| EO | 9,96 | 9,89 | 0,02 | 5,38 | 0,05 | 9,96 | 9,3 | 9,74 | 8,7 | 0,03 | 0,03 | 37,00 |
| ICCAICC | 9,94 | 9,95 | 0,03 | 4,97 | 0,03 | 9,97 | 9,17 | 9,37 | 8,72 | 0,03 | 0,02 | 35,50 |
| ILPGD | 9,9 | 9,82 | 0,03 | 4,54 | 0,08 | 9,96 | 9,02 | 9,36 | 8,51 | 0,01 | 0,03 | 32,00 |
| DD | 9,88 | 9,94 | 0,01 | 3,94 | 0,64 | 9,88 | 7,91 | 8,54 | 7,13 | 0,01 | 0,01 | 29,5 |
| D350 | 5,17 | 5,13 | 2,28 | 5,65 | 0,15 | 9,88 | 9,5 | 6,95 | 6,49 | 4,58 | 4,06 | 7,38 |
| DSCGSAC 350 | 4,83 | 4,73 | 2,60 | 5,42 | 0,14 | 9,83 | 9,45 | 7,04 | 6,44 | 4,59 | 4,26 | 6,96 |
| D50 | 8,50 | 8,48 | 0,04 | 4,93 | 0,02 | 9,97 | 9,97 | 8,8 | 8,8 | 0,01 | 0,03 | 14,00 |
| DSCGSAC 50 | 8,33 | 8,42 | 0,03 | 4,45 | 0,02 | 9,97 | 9,97 | 8,8 | 8,8 | 0,03 | 0,03 | 14,00 |
| CD | 7,17 | 7,23 | 3,05 | 5,93 | 0,03 | 9,97 | 9,96 | 6,68 | 6,64 | 0,99 | 1,00 | 10,00 |
| IM | 9,97 | 9,97 | 0,03 | 5,71 | 0,64 | 9,96 | 9,955 | 9,96 | 9,86 | 0,035 | 0,04 | 35,00 |
| DO | 9,96 | 9,96 | 0,03 | 5,08 | 0,34 | 9,96 | 9,945 | 9,96 | 9,96 | 0,03 | 0,04 | 32,00 |
| EO | 9,81 | 9,77 | 0,02 | 5,24 | 0,18 | 9,91 | 9,36 | 9,53 | 8,71 | 0,04 | 0,03 | 37,27 |
| IL | 9,94 | 9,90 | 0,01 | 5,20 | 0,03 | 9,96 | 9,45 | 9,51 | 8,56 | 0,01 | 0,01 | 36,00 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Óleo de Canola (CO); Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Ciclopentasiloxano e Dimeticonol (CD); Decano (and) Dodecano (DD); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Succinato de diheptilo (e) Capriiloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350); Succinato de diheptilo (e) Capriiloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50); Malato de Diisostearil (DM); Dimeticona 350 (D350); Dimeticona 50 (D50); Ethyl Oleate (EO); Óleo de Girassol (HO); Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC); Laurato de isoamila (IL); Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprilato de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC); Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque

Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Através da Tabela 6 é possível observar que em algumas categorias sensoriais, o conjunto de valores para os emolientes estão no extremo mínimo ou máximo. Por exemplo, o fator pegajosidade possui a maioria dos seus valores $< 0,05$, mas para outros emolientes pode chegar a > 9 .

Como o painel treinado foi realizado para as matérias-primas oleosas (os emolientes), é de se esperar que os emolientes tenham valores altos para os atributos brilho imediato e brilho residual. Para os atributos oleosidade imediata e oleosidade residual, o mesmo pode ser dito, exceto para os emolientes Malato de Diisostearil e Citrato de Triisostearil, que possuem baixa oleosidade, mas um alto filme gorduroso em comparação a outros emolientes. Os atributos espalhabilidade e deslizamento também são altos para todos os emolientes, exceto para Malato de Diisostearil e Citrato de Triisostearil que possuem valores baixos desses atributos, mas altos valores de pegajosidade. Outra peculiaridade dos emolientes Malato de Diisostearil e Citrato de Triisostearil é que estes apresentam valores baixos para filme aveludado e para o atributo ponto de absorção. Porém, os dois possuem valores altos/médios para filmes gordurosos imediatos e residuais. Os emolientes Succinato de Diheptilo (e) Capriloil Glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 e Dimeticona 350 também apresentam valores menores no ponto de absorção, valores altos/médios para filmes gordurosos imediatos e residuais e valores médios para a pegajosidade se comparado aos outros ingredientes.

As médias dos dados físico-químicos experimentais e teóricos de ambos os grupos são mostrados na Tabela 7 e 8. Os dados obtidos por reometria tanto para a viscosidade, quanto para o coeficiente de fricção estão no Apêndice C.

Tabela 7 – Dados físico-químicos dos emolientes do grupo I (n=13).

| Emoliente | Peso molecular (g/mol) | Polarizabilidade (10^{-23} cm ³) | Superfície polar (10^{-15} cm ²) | Log P | Receptor de ligação de H | Tensão Superficial (mN/m) |
|-----------|---------------------------|--|--|-------|-----------------------------|---------------------------------|
| IP | 298,50 | 3,64 | 2,63 | 8,49 | 2 | 30,1 |
| IM | 270,50 | 3,27 | 2,60 | 7,43 | 2 | 29,7 |
| DE | 242,40 | 3,09 | 0,90 | 7,36 | 1 | 28,1 |
| DO | 422,70 | 5,30 | 2,60 | 12,94 | 2 | 31,8 |
| II | 284,50 | 3,45 | 2,63 | 7,78 | 2 | 27,8 |
| PC | 284,00 | 3,46 | 2,63 | 7,96 | 2 | 29,9 |
| O | 298,50 | 3,81 | 2,00 | 9,19 | 1 | 31,1 |
| DM | 639,00 | 7,62 | 7,30 | 16,87 | 5 | 34,4 |
| TC | 949,60 | 11,37 | 9,90 | 26,45 | 7 | 34,8 |
| EO | 310,50 | 3,83 | 2,60 | 8,69 | 2 | 31,0 |
| IL | 270,50 | 3,27 | 2,60 | 7,43 | 2 | 29,7 |
| C | 370,77 | 3,92 | 4,62 | 5,20 | 5 | 19,0 |
| CCT | 526,80 | 5,98 | 7,90 | 9,47 | 6 | 34,7 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Malato de Diisostearil (DM); Ethyl Oleate (EO); Laurato de isoamila (IL); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprilato de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC)

A Tabela 7 mostra que o peso molecular dos emolientes do grupo I está entre 200 e 950 g/mol. A polarizabilidade permanece entre os valores de 3 a $5,5 \cdot 10^{-23}$ m³, exceto para o Malato de Diisostearil, Citrato de Triisostearil e Triglicerídeo Caprílico/Cáprico, ou seja, possuem uma capacidade maior de polarizar frente a um campo elétrico em relação aos outros emolientes. Isso pode ser justificado, uma vez que tais emolientes possuem duas e três ligações ésteres respectivamente. Da mesma forma, a superfície polar para esses emolientes é maior, enquanto para o único éter da tabela (éter dicaprílico) é menor. Todos os valores de log P se encontram na faixa de substâncias lipofílicas. Em relação à tensão superficial, o único emoliente que se destoa é o ciclopentasiloxano com uma baixa tensão superficial que é característica de silicones.

Tabela 8 – Dados físico-químicos dos emolientes do grupo II (n=20).

| Emoliente | Densidade (g/mL) | Coefficiente de fricção | Índice de refração | Viscosidade (cP) | Teor de voláteis (%) | Tensão Superficial (mN/m) | Tensão Interfacial (mN/m) |
|-------------|------------------|-------------------------|--------------------|------------------|----------------------|---------------------------|---------------------------|
| IP | 0,854 | 0,093 | 1,438 | 7,670 | 0,199 | 28,373 | 27,11 |
| DE | 0,803 | 0,121 | 1,431 | 4,953 | 0,200 | 27,262 | 34,65 |
| II | 0,854 | 0,128 | 1,436 | 6,123 | 0,300 | 26,131 | 28,79 |
| PC | 0,860 | 0,106 | 1,439 | 6,048 | 0,100 | 27,715 | 33,48 |
| CCT | 0,941 | 0,104 | 1,450 | 24,928 | 0,199 | 29,071 | 21,49 |
| O | 0,842 | 0,098 | 1,452 | 45,346 | 0,100 | 29,188 | 29,78 |
| CO | 0,915 | 0,085 | 1,473 | 57,759 | 0,199 | 32,908 | 25,64 |
| HO | 0,905 | 0,092 | 1,469 | 60,443 | 0,199 | 32,737 | 26,99 |
| DM | 0,908 | 0,118 | 1,460 | 2306,630 | 0,100 | 26,937 | 22,15 |
| TC | 0,903 | 0,119 | 1,461 | 5349,302 | 0,100 | 23,702 | 38,75 |
| C | 0,954 | 0,151 | 1,396 | 5,349 | 1,101 | 18,230 | 39,39 |
| EO | 0,868 | 0,109 | 1,451 | 7,294 | 0,199 | 30,423 | 27,60 |
| ICCAICC | 0,857 | 0,112 | 1,428 | 4,238 | 0,497 | 26,794 | 5,00 |
| ILPGD | 0,854 | 0,098 | 1,438 | 7,305 | 0,200 | 28,849 | 28,36 |
| DD | 0,745 | 0,117 | 1,421 | 3,107 | 0,893 | 24,239 | 49,86 |
| D350 | 0,972 | 0,176 | 1,406 | 318,160 | 0,199 | 20,642 | 30,14 |
| DSCGSAC 350 | 0,994 | 0,086 | 1,455 | 339,882 | 0,100 | 31,133 | 10,78 |
| D50 | 0,957 | 0,179 | 1,433 | 46,127 | 0,200 | 21,545 | 39,51 |
| DSCGSAC 50 | 0,962 | 0,100 | 1,447 | 45,387 | 0,097 | 30,340 | 13,62 |
| CD | 0,958 | 0,140 | 1,399 | 3433,255 | 0,399 | 18,691 | 38,85 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Óleo de Canola (CO); Triglicérido Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Ciclopentasiloxano e Dimeticonol (CD); Decano (and) Dodecano (DD); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350); Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50); Malato de Diisostearil (DM); Dimeticona 350 (D350); Dimeticona 50 (D50); Ethyl Oleate (EO); Óleo de Girassol (HO); Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC); Laurato de isoamila (IL); Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprilato de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC);

A Tabela 8 mostra que todos os emolientes classificados como silicone possuem valores menores de tensão superficial e os mais altos coeficientes de fricção. A viscosidade dos emolientes apresentou uma faixa ampla de valores de 3,11 cP a 5349,30 cP. O teor de voláteis não foi muito expressivo, exceto para os emolientes Cyclopentasiloxane e Decano (e) Dodecano, com valor igual a 1,10 e 0,89%, respectivamente. Além disso, as misturas Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool

isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico, Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 e 50, apresentaram valores baixos para a tensão interfacial. Tal observação pode ser explicada devido ao primeiro emoliente citado possuir água em sua mistura e os outros dois possuem Capriloil Glicerina, reduzindo a tensão entre as superfícies água-emoliente.

Com todos os experimentos realizados, a criação dos modelos foi iniciada. Primeiramente, para os conjuntos de dados x (parâmetros físico-químicos) e y (parâmetros sensoriais) foi realizada uma investigação da correlação linear univariada. Os resultados estão dispostos nas Tabelas 9 e 10.

Tabela 9 – Matriz de correlação entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

| Atributo Sensorial | Peso molecular (g/mol) | Polarizabilidade (10^{-23} cm ³) | Superfície polar (10^{-15} cm ²) | Log P | Receptor de ligação de H | Tensão Superficial (mN/m) |
|--------------------|------------------------|---|---|--------------|--------------------------|---------------------------|
| E | -0,87 | -0,88 | -0,77 | -0,89 | -0,67 | -0,48 |
| D | -0,87 | -0,88 | -0,77 | -0,89 | -0,67 | -0,48 |
| P | 0,87 | 0,88 | 0,77 | 0,89 | 0,67 | 0,48 |
| FA | -0,85 | -0,85 | -0,74 | -0,85 | -0,68 | -0,33 |
| TS | -0,46 | -0,48 | -0,34 | -0,53 | -0,26 | -0,33 |
| BI | -0,93 | -0,93 | -0,80 | -0,93 | -0,72 | -0,40 |
| BR | -0,66 | -0,62 | -0,63 | -0,53 | -0,71 | 0,18 |
| OI | -0,87 | -0,88 | -0,78 | -0,87 | -0,70 | -0,41 |
| OR | -0,85 | -0,84 | -0,77 | -0,82 | -0,71 | -0,31 |
| FGI | 0,83 | 0,84 | 0,74 | 0,84 | 0,64 | 0,48 |
| FGR | 0,78 | 0,79 | 0,70 | 0,79 | 0,60 | 0,48 |
| PA | -0,88 | -0,88 | -0,80 | -0,85 | -0,70 | -0,45 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Tabela 10 – Matriz de correlação entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo II.

| Atributo Sensorial | Densidade (g/mL) | Coefficiente de fricção | Índice de refração | Viscosidade (cP) | Teor de voláteis (%) | Tensão Superficial (mN/m) | Tensão Interfacial (mN/m) |
|--------------------|------------------|-------------------------|--------------------|------------------|----------------------|---------------------------|---------------------------|
| E | -0,37 | -0,18 | -0,19 | -0,78 | 0,30 | 0,22 | 0,04 |
| D | -0,37 | -0,18 | -0,19 | -0,77 | 0,30 | 0,22 | 0,04 |
| P | 0,22 | 0,11 | 0,22 | 0,86 | -0,25 | -0,22 | 0,04 |
| FA | 0,04 | -0,07 | -0,23 | -0,67 | 0,03 | 0,18 | -0,13 |
| TS | -0,43 | -0,23 | 0,04 | -0,41 | 0,24 | 0,20 | 0,29 |
| BI | -0,09 | -0,06 | -0,27 | -0,83 | 0,14 | 0,19 | -0,15 |
| BR | 0,28 | -0,13 | 0,22 | -0,30 | -0,60 | 0,35 | -0,33 |
| OI | -0,26 | -0,21 | -0,11 | -0,84 | 0,14 | 0,32 | -0,08 |
| OR | -0,22 | -0,23 | -0,02 | -0,80 | 0,01 | 0,37 | -0,12 |
| FGI | 0,52 | 0,22 | -0,06 | 0,29 | -0,24 | -0,17 | -0,21 |
| FGR | 0,52 | 0,21 | -0,07 | 0,26 | -0,23 | -0,16 | -0,22 |
| PA | -0,64 | -0,26 | -0,13 | -0,63 | 0,29 | 0,24 | 0,03 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Não existe consenso de quão alta deve ser a correlação de Pearson, mas podemos considerar a seguinte faixa:

- Forte correlação: $|0,7|$ a $|0,9|$;
- Moderada correlação: $|0,4|$ a $|0,699|$;
- Fraca correlação: $|0,2|$ a $|0,399|$.

Portanto, as relações com forte correlação (em negrito) foram graficamente investigadas para os dois grupos. As Figuras 24 e 25 compilam os gráficos da apuração de correlações lineares simples.

Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(continua).

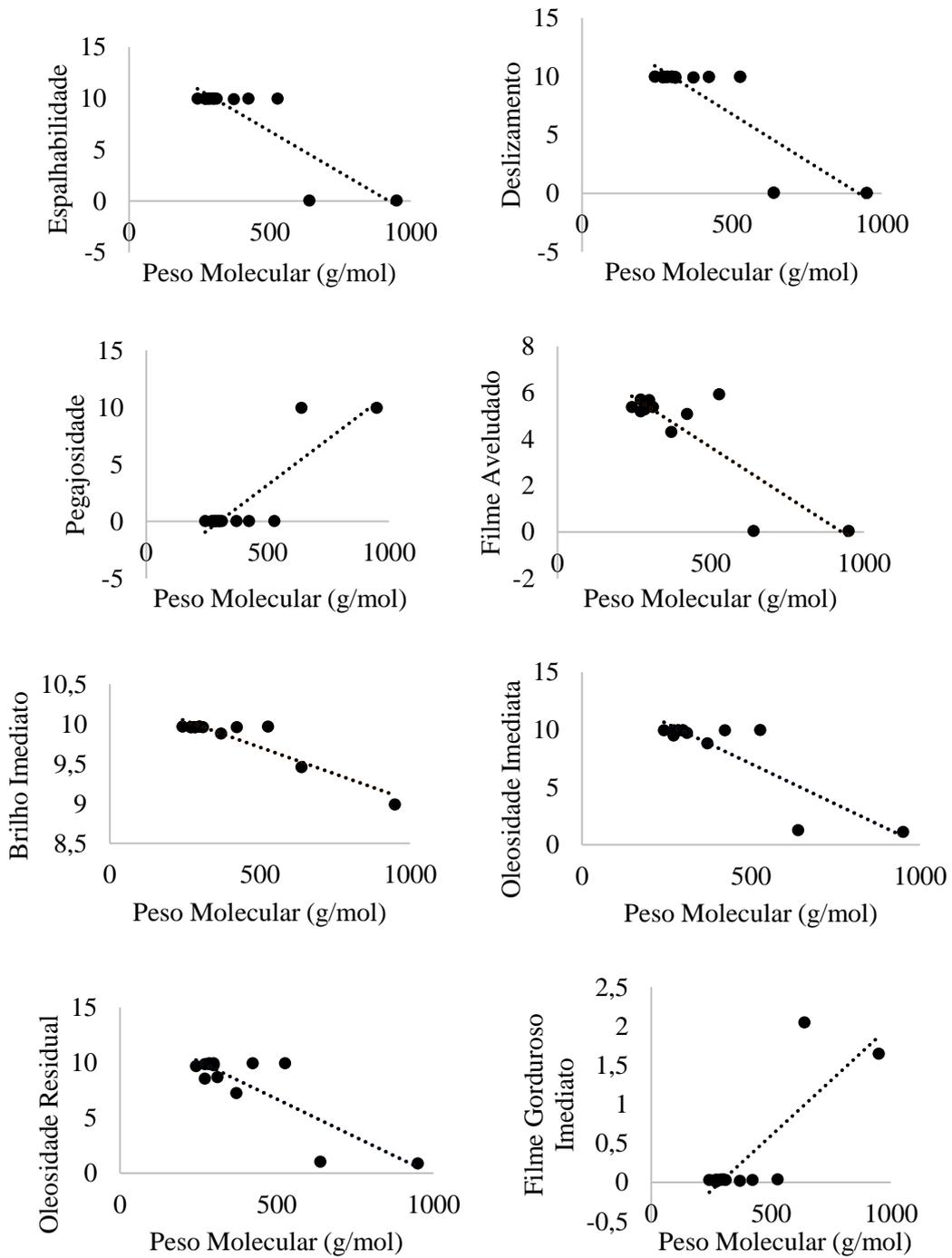


Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(continua).

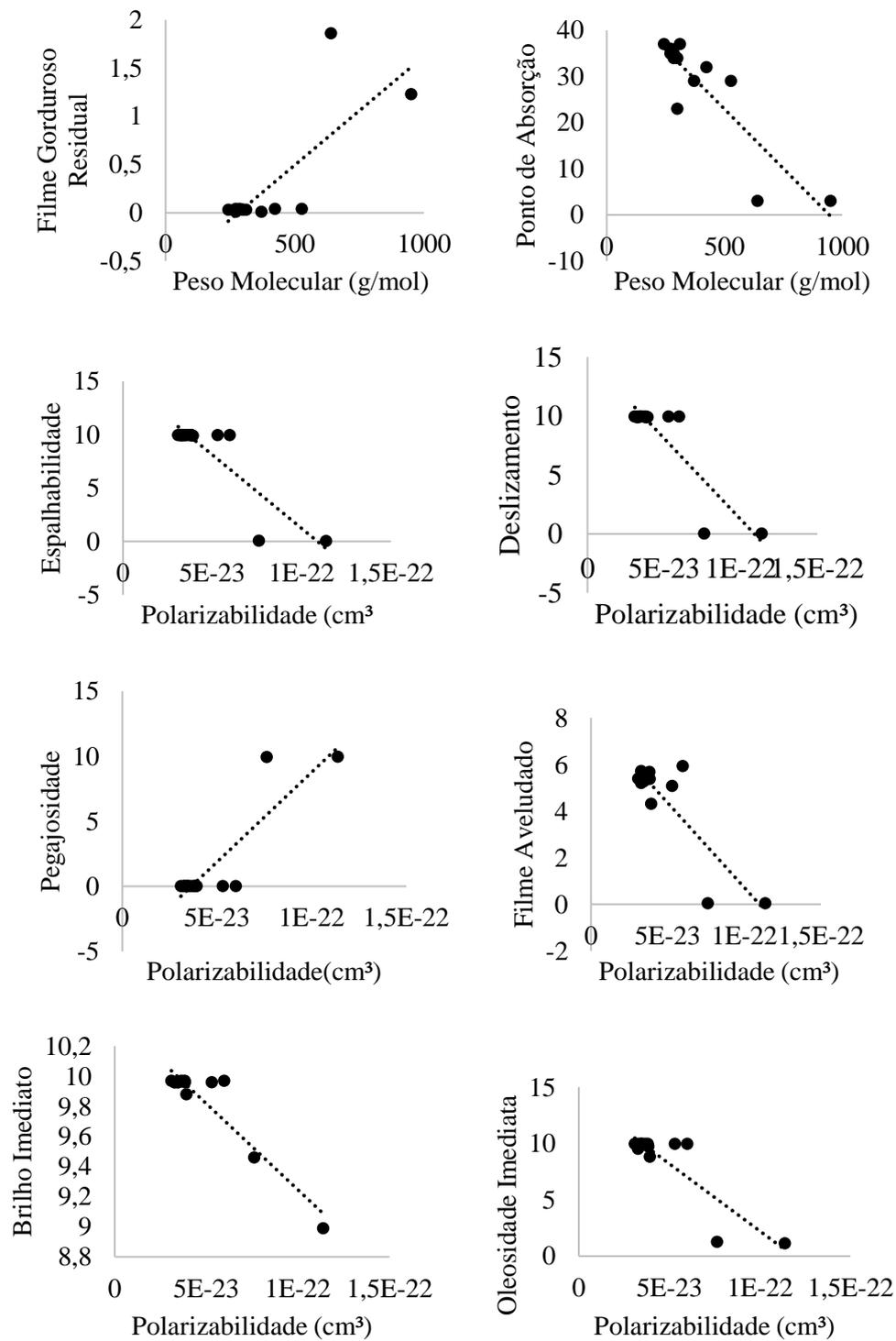


Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(continua).

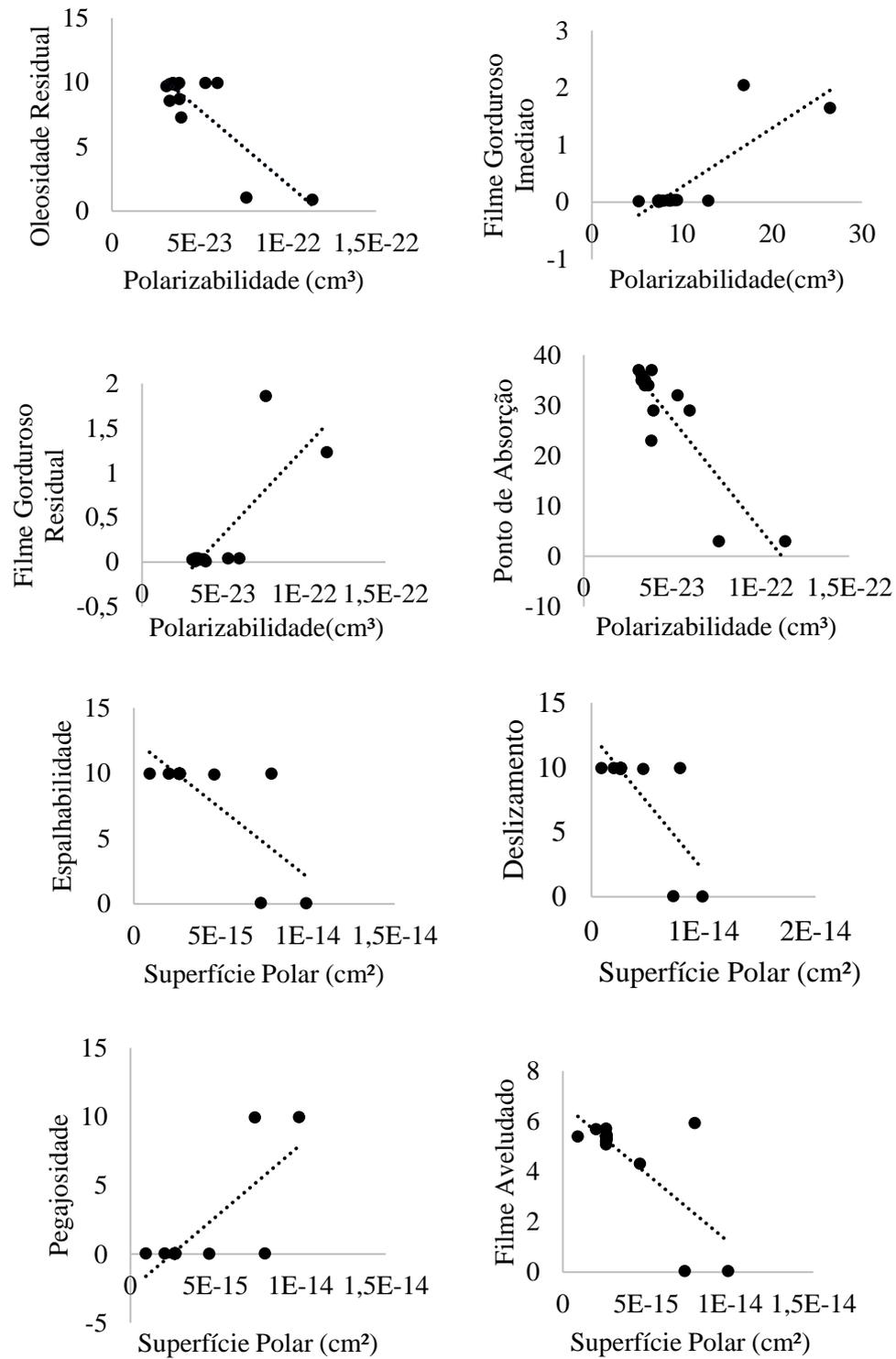


Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(continua).

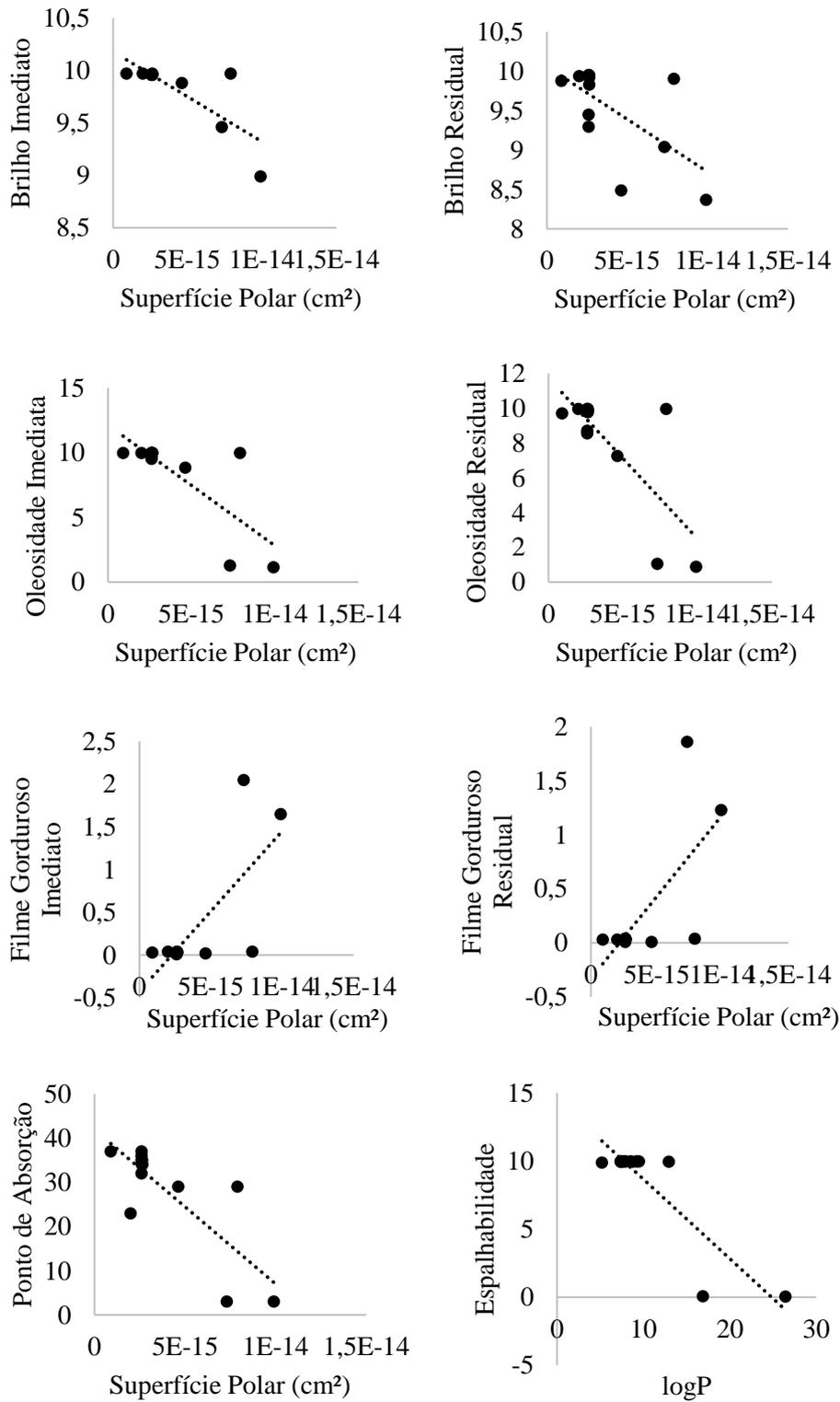


Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(continua).

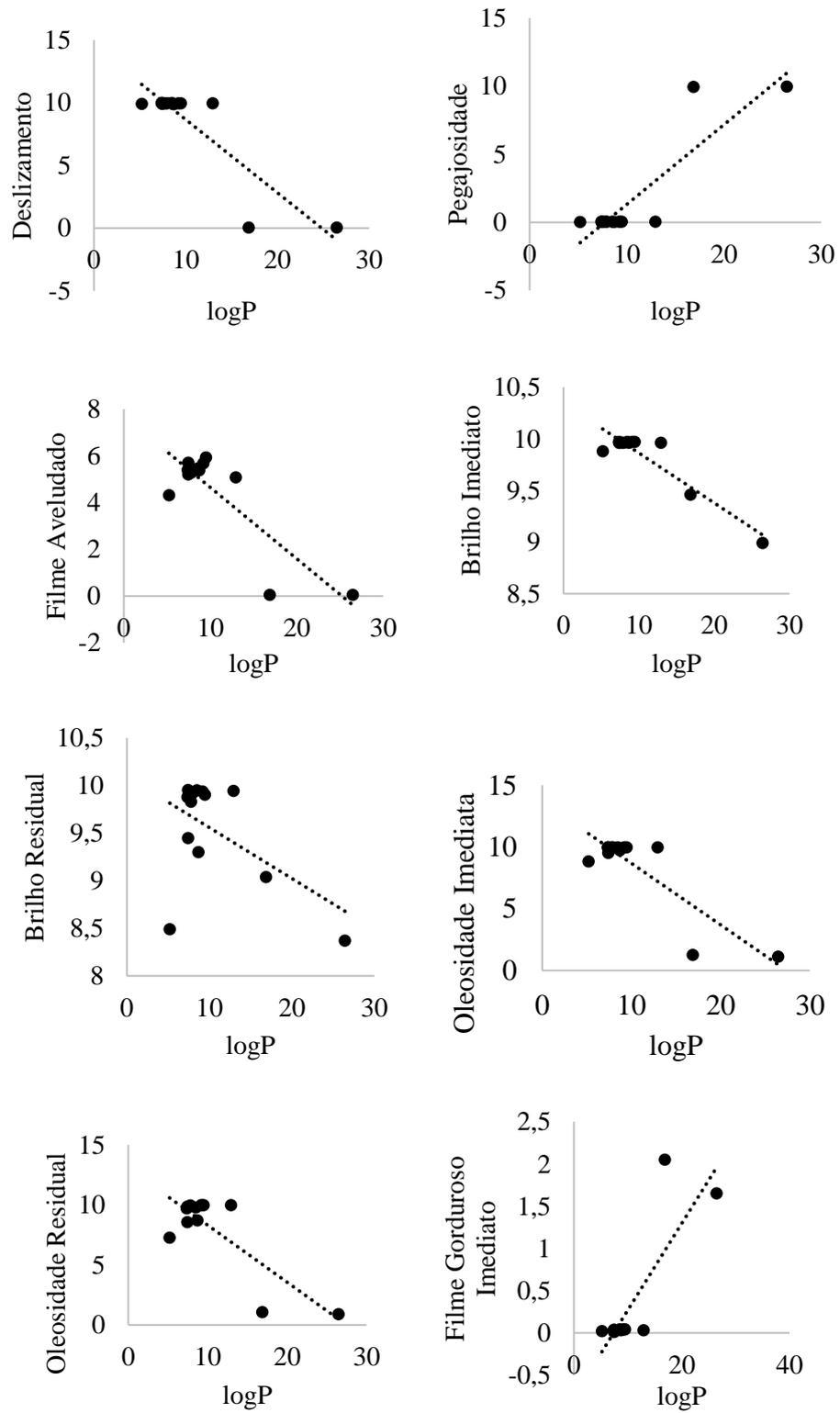
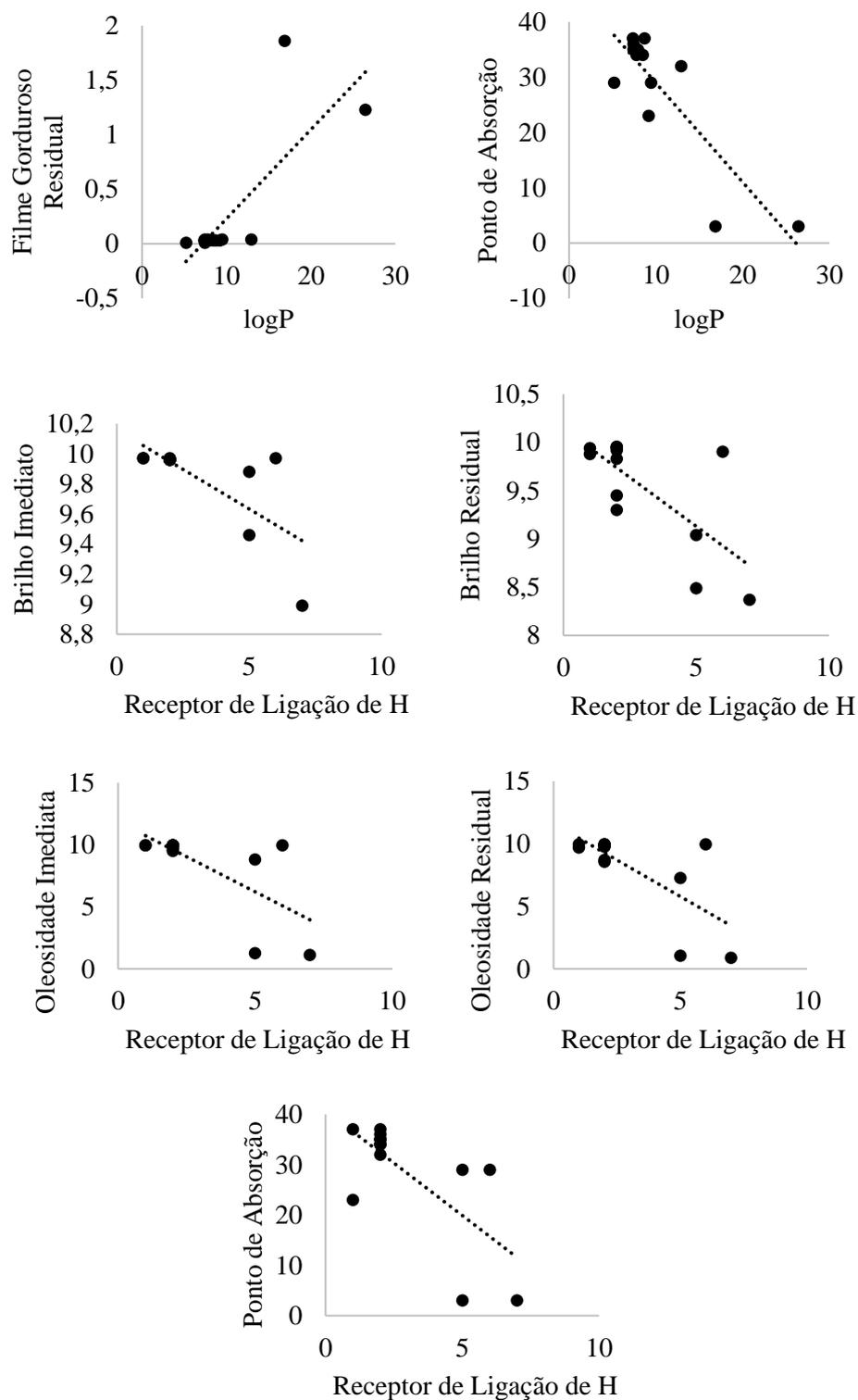


Figura 24 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo I.

(conclusão).



Fonte: da autora (2021).

A partir dos gráficos, observa-se uma possível correlação entre o atributo sensorial brilho imediato com as propriedades físico-químicas: peso molecular, polarizabilidade, superfície polar e log P. Também é possível observar prováveis correlações entre a superfície polar e peso molecular com o ponto de absorção. A superfície polar também parece estar relacionada com a oleosidade imediata e a oleosidade residual. Para o restante dos gráficos, os pontos extremos podem ser os responsáveis pelo coeficiente de correlação linear elevado.

Apesar de Miyahara (2017) encontrar uma correlação negativa entre peso molecular e espalhabilidade para hidrocarbonetos, no presente trabalho, foram utilizadas diferentes classes químicas. Portanto, outras propriedades originadas das estruturas químicas como a presença de as ligações Si-O de silicones, dos oxigênios presentes nos ésteres e éteres e as hidroxilas dos ácidos graxos e álcool graxos, podem influenciar na sensação de espalhamento do emoliente na pele. No entanto, o peso molecular parece estar relacionado negativamente com o ponto de absorção, ou seja, quanto maior o peso molecular, menor o valor do ponto de absorção. A superfície polar que pode ser tratada como um indicativo da polaridade da molécula e os atributos sensoriais oleosidade imediata e residual, apresentam uma correlação negativa, visto que um emoliente apolar tende a possuir um sensorial mais pesado e oleoso.

Figura 25 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo II.

(continua).

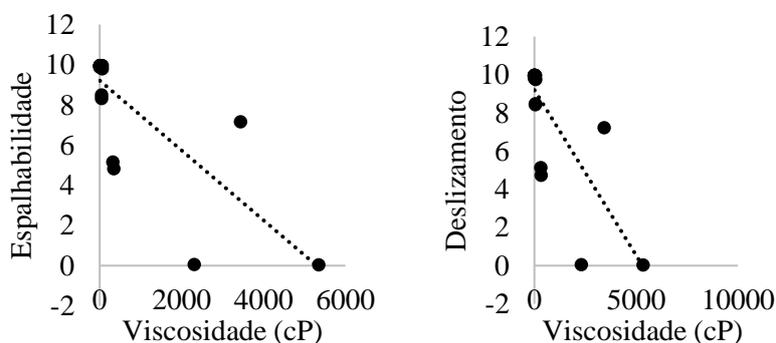
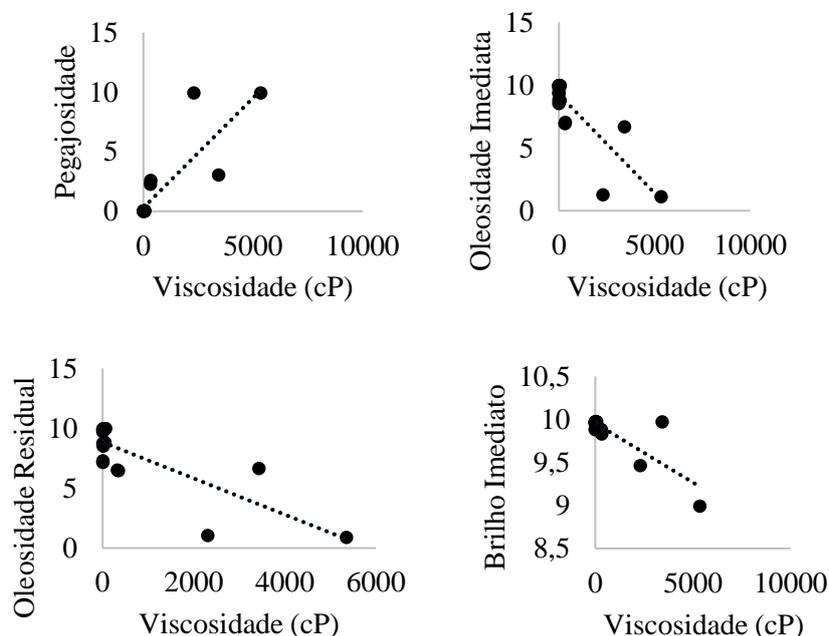


Figura 25 – Correlação linear entre parâmetros sensoriais e físico-químicos dos emolientes do grupo II.

(conclusão).



Fonte: da autora (2021).

A Figura 25 apresenta graficamente as possíveis correlações lineares para a propriedade viscosidade, uma vez que somente ela apresentou valores do coeficiente de Pearson elevados. Como a viscosidade é definida como a resistência ao movimento do fluido, é esperada alguma relação entre espalhabilidade, deslizamento e pegajosidade. Porém, uma possível correlação com a viscosidade foi observada somente para pegajosidade, oleosidade imediata, oleosidade residual e brilho imediato. Esses resultados estão em desacordo com os estudos de Douguet et al. (2017) e Parente, Gámbaro e Solana (2005) que constataram, por meio de análises estatísticas, que a viscosidade possui interferência no comportamento da espalhabilidade, independentemente da classe química.

Concomitantemente, a investigação de colinearidade entre todos x e todos y separadamente foi realizada, para verificar se duas ou mais variáveis possuem um alto grau de correlação. As Tabelas de 11 a 12 mostram os testes de correlação de Pearson para os grupos I e II, respectivamente. As relações com forte correlação (em negrito) foram graficamente investigadas para os dois grupos (APÊNDICES E e D).

Tabela 11 – Matriz de correlação entre parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo I (n=13).

| Propriedade | Peso molecular (g/mol) | Polarizabilidade (10^{-23} cm ³) | Superfície polar (10^{-15} cm ²) | Log P | Receptor de ligação de H | Tensão Superficial (mN/m) |
|---|------------------------|---|---|-------|--------------------------|---------------------------|
| Peso molecular (g/mol) | 1,00 | | | | | |
| Polarizabilidade (10^{-23} cm ³) | 1,00* | 1,00 | | | | |
| Superfície polar (10^{-15} cm ²) | 0,93* | 0,90* | 1,00 | | | |
| LogP | 0,93* | 0,96* | 0,75 | 1,00 | | |
| Receptor de ligação de H | 0,86* | 0,81 | 0,97* | 0,62 | 1,00 | |
| Tensão Superficial (mN/m) | 0,51 | 0,56 | 0,44 | 0,63 | 0,22 | 1,00 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: O * indica que a investigação gráfica confirma a correlação entre as propriedades.

Tabela 12 – Matriz de correlação entre parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo II (n=20).

| Propriedade | Densidade (g/mL) | Coefficiente de fricção | Índice de refração | Viscosidade (cP) | Teor de voláteis (%) | Tensão Superficial (mN/m) | Tensão Interfacial (mN/m) |
|---------------------------|------------------|-------------------------|--------------------|------------------|----------------------|---------------------------|---------------------------|
| Densidade (g/mL) | 1,00 | | | | | | |
| Coefficiente de fricção | 0,28 | 1,00 | | | | | |
| Índice de refração | -0,03 | -0,69 | 1,00 | | | | |
| Viscosidade (cP) | 0,20 | 0,14 | 0,05 | 1,00 | | | |
| Teor de voláteis (%) | -0,20 | 0,31 | -0,65 | -0,15 | 1,00 | | |
| Tensão Superficial (mN/m) | -0,18 | -0,86* | 0,84* | -0,37 | -0,54 | 1,00 | |
| Tensão Interfacial (mN/m) | -0,32 | 0,46 | -0,39 | 0,24 | 0,40 | -0,57 | 1,00 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: O * indica que a investigação gráfica confirma a correlação entre as propriedades.

As propriedades polarizabilidade, superfície polar, receptor de ligação de hidrogênio e log P estão correlacionadas positivamente com o peso molecular. A relação

positiva entre o log P e o peso molecular pode ser explicada devido a sensibilidade das propriedades das classes químicas aqui estudadas: com o aumento da cadeia de hidrocarbonetos, uma maior hidrofobicidade é contabilizada na molécula e, portanto, o log P consegue representar isso. A polarizabilidade e a superfície polar podem ser vistas como indicativo da polaridade de uma molécula (ALANDER, 2019), e, portanto, estarem correlacionadas positivamente traz algum sentido. As propriedades superfície polar e receptores de ligação de hidrogênio parecem estar correlacionadas. Segundo Ertl (2007), a informação sobre a superfície polar pode trazer alguma informação sobre as características de ligação de hidrogênio.

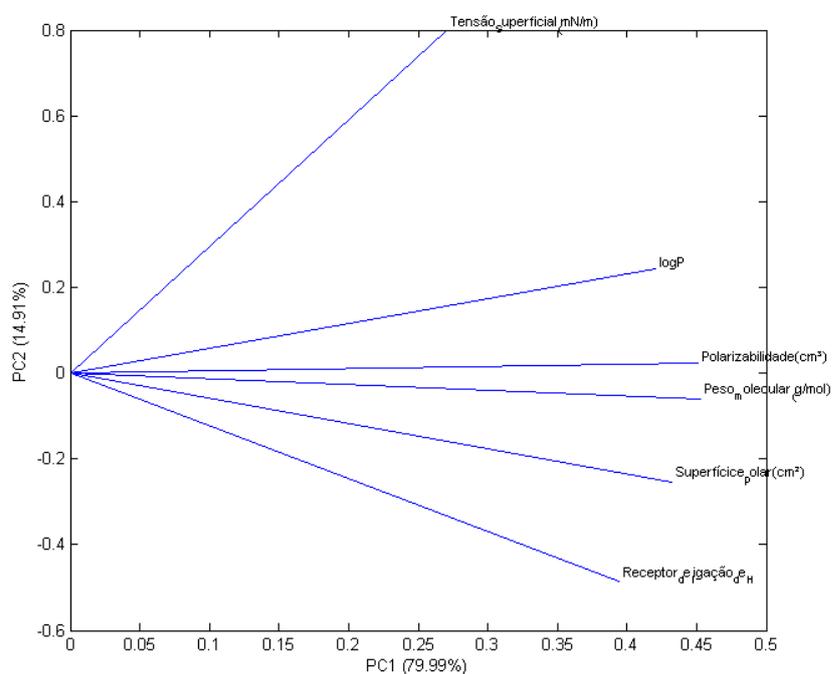
Chao *et al.*, (2018), também encontraram valores altos na correlação entre índice de refração e tensão superficial ($R^2 = 0,806$) para o conjunto emolientes contendo ésteres, hidrocarbonetos, éteres e silicones. Os autores atribuíram tal correlação imprevista às características específicas do conjunto de dados estudados.

Na análise PCA realizada, a PC1 (Componente Principal 1) explica ou contém cerca de 79,99% da variância dos dados originais. As PC's 2 e 3 explicam 14,91 e 4,98%, respectivamente. Os demais PC's (de 4 a 10) explicam muito pouco dos dados originais (0,12% ao todo). Da mesma forma, para os dados dos emolientes do grupo II, a PC1 explicou cerca de 53% da variância dos dados originais. As PC's 2 e 3 explicaram 21% e 15%, respectivamente.

As Figuras 26 e 27 mostram graficamente como as propriedades físico-químicas de ambos os grupos se comportam na análise PCA. A projeção da propriedade em cada PC representa o seu peso e os ângulos entre as projeções se referem a como as propriedades se correlacionam entre si.

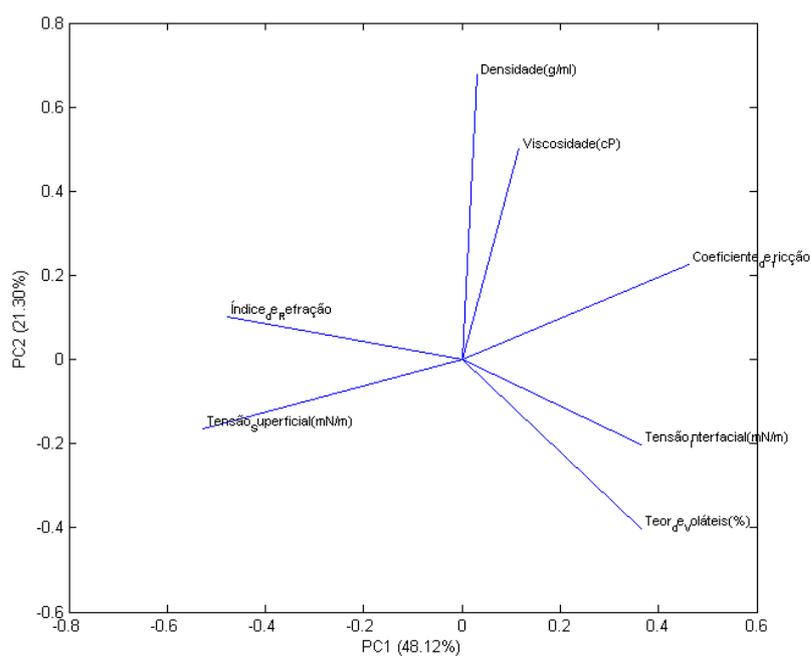
Como a Figura 26 mostra, as propriedades log P, polarizabilidade, superfície polar, peso molecular e receptores de ligação de hidrogênio possuem maior contribuição positiva na PC1, indicando que a variabilidade dos conjuntos de dados pode ser explicada principalmente por essas cinco propriedades. Além disso, para os emolientes do grupo I, o conjunto de propriedades polarizabilidade e peso molecular parecem estar correlacionadas, devido ao pequeno ângulo formado pelos vetores respectivos.

Figura 26 – Gráficos das componentes principais PC1 e PC2 com os pesos das propriedades físico-químicas do grupo I.



Fonte: da autora (2021).

Figura 27 – Gráficos das componentes principais PC1 e PC2 com os pesos das propriedades físico-químicas do grupo II.



Fonte: da autora (2021).

Como a Figura 27 mostra, as propriedades coeficiente de fricção, tensão interfacial, teor de voláteis, índice de refração e tensão superficial possuem maior contribuição na PC1, indicando que a variabilidade dos conjuntos de dados pode ser explicada principalmente por essas propriedades. Para os emolientes do grupo II, a PCA indicou que provavelmente a tensão superficial e o coeficiente de fricção possuem contribuições de mesmo peso, ainda que em direções opostas (ângulo entre vetores de aproximadamente 180°). O mesmo ocorreu para a tensão interfacial e o índice de refração. O conjunto densidade e viscosidade também parecem estar correlacionados, assim como a tensão interfacial e teor de voláteis.

A partir da PCA em conjunto com os testes de coeficiente de Pearson, verificou-se que algumas propriedades possuem um alto grau de correlação e devem ser excluídas para os próximos passos envolvendo modelagem, uma vez que variáveis altamente correlacionadas poderiam contribuir de forma redundante para os modelos. As variáveis que não apresentaram nenhuma correlação foram escolhidas, assim como uma de cada conjunto de variáveis correlacionadas.

5.1 Modelos preditivos por MLR

Para o grupo I, as propriedades físico-químicas polarizabilidade, receptor de ligação de hidrogênio e tensão superficial foram usadas como descritores nos modelos. Para o grupo II, os descritores usados foram a viscosidade, tensão superficial e tensão interfacial. Essas variáveis foram usadas por não terem indícios de colinearidade conforme coeficientes de Pearson e PCA.

A MLR foi usada para a obtenção de modelos matemáticos que descrevessem a relação entre as propriedades físico-químicas e atributos sensoriais. Nas Tabelas 13 e 15 se encontram os parâmetros utilizados para avaliar os modelos obtidos (as tabelas com todos os dados estão nos Apêndices F e G). Com o mesmo intuito, as tabelas 14 e 16 apresentam os erros percentuais entre os valores medidos e previstos pelo modelo.

Tabela 13 – Parâmetros de desempenho dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I (continua).

| Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | | | | | | | | | |
|------------------|----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|
| | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
| $RMSE_c$ | 1,72 | 1,70 | 0,86 | 0,92 | 0,22 | 0,09 | 0,21 | 1,52 | 1,03 | 0,35 | 0,31 | 4,11 |
| R^2_{cal} | 0,66 | 0,67 | 0,92 | 0,68 | 0,25 | 0,91 | 0,80 | 0,65 | 0,85 | 0,67 | 0,67 | 0,82 |
| $RMSE_{Y-rand}$ | 2,22 | 2,02 | 2,22 | 1,29 | 0,20 | 0,24 | 0,36 | 2,13 | 2,07 | 0,48 | 0,39 | 7,68 |
| R^2_{Y-rand} | 0,37 | 0,46 | 0,36 | 0,31 | 0,34 | 0,26 | 0,36 | 0,28 | 0,31 | 0,35 | 0,41 | 0,33 |
| $R^2_{p-Y-rand}$ | 0,45 | 0,38 | 0,71 | 0,51 | 0,00 | 0,77 | 0,59 | 0,49 | 0,67 | 0,46 | 0,42 | 0,63 |
| $RMSE_{cv}$ | 5,77 | 5,75 | 4,18 | 3,16 | 0,53 | 0,47 | 0,50 | 6,54 | 4,98 | 1,17 | 1,14 | 16,00 |
| R^2_{cv} | 0,03 | 0,03 | 0,02 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,20 | 0,01 | 0,00 | 0,03 | 0,03 | 0,08 |
| $RMSE_p$ | 3,06 | 3,30 | 3,49 | 2,09 | 0,35 | 0,07 | 0,37 | 2,60 | 5,95 | 0,85 | 0,93 | 13,66 |
| R^2_{pred} | 1,00 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | 0,97 | 1,00 | 0,81 | 1,00 | 0,94 | 1,00 | 1,00 | 0,90 |

Tabela 13 – Parâmetros de desempenho dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I (conclusão).

| Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | | | | | | | | | |
|-----------------|----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
| $R^2_{m(test)}$ | 0,59 | 0,58 | 0,75 | 0,54 | 0,22 | 0,74 | 0,79 | 0,60 | 0,30 | 0,92 | 0,89 | 0,52 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Tabela 14 – Erros Percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo I

(continua).

| Atributo | Amostra | Medida | Previsão | Erro (%) |
|----------|---------|--------|----------|----------|
| E | a | 9,97 | 10,33 | 3,57 |
| | b | 9,97 | 10,75 | 7,84 |
| | c | 0,04 | -5,18 | 13055,25 |
| D | a | 9,97 | 10,39 | 4,22 |
| | b | 9,97 | 11,29 | 13,29 |
| | c | 0,04 | -5,51 | 13878,22 |
| P | a | 0,03 | -0,38 | 1354,37 |
| | b | 9,94 | 3,99 | 59,86 |
| | c | 0,01 | -0,94 | 9460,01 |
| TS | a | 0,34 | 0,10 | 70,33 |
| | b | 0,64 | 0,38 | 40,51 |
| | c | 0,04 | -0,44 | 1205,70 |

Tabela 14 – Erros Percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo I

(conclusão).

| Atributo | Amostra | Medida | Previsão | Erro (%) |
|----------|---------|--------|----------|----------|
| BI | a | 9,97 | 9,99 | 0,22 |
| | b | 9,96 | 9,97 | 0,12 |
| | c | 9,46 | 9,58 | 1,24 |
| BR | a | 9,95 | 9,88 | 0,74 |
| | b | 8,37 | 8,38 | 0,11 |
| | c | 9,30 | 9,93 | 6,77 |
| OI | a | 9,96 | 10,51 | 5,54 |
| | b | 9,96 | 10,02 | 0,58 |
| | c | 1,12 | -3,35 | 398,98 |
| OR | a | 9,96 | 4,69 | 52,89 |
| | b | 9,95 | 9,00 | 9,53 |
| | c | 0,88 | -7,94 | 1001,73 |
| FGI | a | 0,04 | -0,04 | 209,92 |
| | b | 0,03 | -0,13 | 537,06 |
| | c | 1,65 | 3,12 | 178,12 |
| FGR | a | 0,03 | -0,12 | 511,61 |
| | b | 0,03 | -0,11 | 472,91 |
| | c | 1,23 | 2,83 | 130,40 |
| PA | a | 34 | 35,61 | 4,73 |
| | b | 23,00 | 33,90 | 47,40 |
| | c | 3,00 | -17,95 | 698,21 |
| FA | a | 5,45 | 5,66 | 3,91 |
| | b | 5,71 | 6,18 | 8,27 |
| | c | 0,04 | -3,55 | 8974,45 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Para todos os atributos sensoriais estudados aqui, foi possível obter o $R_{cal}^2 > 0,6$, com exceção do atributo toque seco. Apesar de alguns modelos para os emolientes do grupo I terem apresentado R^2_m e $R^2_{p-y-rand} > 0,5$ ou R^2_{pred} alto, os erros de predição ($RMSE_p$) (Tabela 13) e os erros percentuais de previsão (Tabela 14) foram elevados, principalmente para os valores mais baixos. Logo, esses modelos não tiveram boa capacidade preditiva para amostras externas à calibração. Isso pode ter ocorrido devido ao número pequeno de observações, tanto para calibração e sobretudo para teste. Apenas o modelo gerado para o atributo brilho imediato apresentou valores R^2_m e $R^2_{p-y-rand} > 0,5$, $RMSE_p$ baixos e erros percentuais de previsão abaixo de 1,5%.

Tabela 15 – Parâmetros de desempenho dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II.

(continua).

| Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | | | | | | | | | |
|------------------|----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|
| | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
| $RMSE_c$ | 2,01 | 2,02 | 0,78 | 0,51 | 0,20 | 0,14 | 0,45 | 1,38 | 1,65 | 1,02 | 0,91 | 8,93 |
| R^2_{cal} | 0,46 | 0,45 | 0,90 | 0,86 | 0,36 | 0,69 | 0,26 | 0,59 | 0,45 | 0,27 | 0,27 | 0,32 |
| $RMSE_{y-}$ | 2,42 | 2,48 | 2,24 | 1,18 | 0,23 | 0,24 | 0,44 | 1,86 | 1,95 | 1,10 | 0,95 | 9,25 |
| R^2_{Y-rand} | 0,21 | 0,16 | 0,18 | 0,19 | 0,14 | 0,14 | 0,28 | 0,26 | 0,21 | 0,16 | 0,19 | 0,27 |
| $R^2_{p-Y-rand}$ | 0,34 | 0,36 | 0,81 | 0,75 | 0,28 | 0,62 | 0,00 | 0,45 | 0,33 | 0,18 | 0,14 | 0,13 |
| $RMSE_{ev}$ | 4,26 | 4,18 | 1,62 | 3,75 | 0,24 | 0,25 | 0,75 | 3,11 | 3,48 | 1,39 | 1,30 | 97,25 |
| R^2_{ev} | 0,04 | 0,04 | 0,58 | 0,90 | 0,14 | 0,16 | 0,16 | 0,13 | 0,05 | 0,01 | 0,00 | 0,22 |

Tabela 15 – Parâmetros de desempenho dos modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II.
(conclusão).

| Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | | | | | | | | | |
|-----------------|----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
| $RMSE_p$ | 0,67 | 0,84 | 3,21 | 2,64 | 0,20 | 0,06 | 1,02 | 1,63 | 0,93 | 2,06 | 1,94 | 8,48 |
| R^2_{pred} | 1,00 | 1,00 | 0,88 | 0,02 | 0,91 | 0,17 | 0,85 | 0,94 | 0,97 | 0,74 | 0,96 | 0,86 |
| $R^2_{m(test)}$ | 0,94 | 0,94 | 0,86 | 0,00 | 0,87 | 0,00 | 0,00 | 0,77 | 0,84 | 0,32 | 0,90 | 0,36 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Tabela 16 – Erros Percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo II.

(continua).

| Atributo | Amostra | Medida | Previsão | Erro % |
|----------|---------|--------|----------|---------|
| E | a | 8,33 | 7,97 | 4,35 |
| | b | 9,96 | 9,02 | 9,48 |
| | c | 0,04 | 0,41 | 920,96 |
| | d | 9,96 | 9,18 | 7,85 |
| D | a | 9,97 | 9,00 | 9,70 |
| | b | 9,95 | 8,92 | 10,38 |
| | c | 0,04 | 0,45 | 1012,56 |
| | d | 9,89 | 9,09 | 8,04 |
| P | a | 0,03 | 0,18 | 512,78 |
| | b | 0,03 | 0,67 | 2123,86 |
| | c | 9,94 | 3,98 | 59,91 |
| | d | 2,28 | 0,00 | 100,11 |
| TS | a | 0,71 | 0,40 | 42,96 |
| | b | 0,43 | 0,20 | 52,94 |
| | c | 0,03 | 0,08 | 154,49 |
| | d | 0,03 | -0,06 | 284,64 |

Tabela 16 – Erros Percentuais entre as propriedades sensoriais medidas e previstas (grupo teste) do grupo II.

(conclusão).

| Atributo | Amostra | Medida | Previsão | Erro % |
|----------|---------|--------|----------|---------|
| BI | a | 9,96 | 9,93 | 0,27 |
| | b | 9,97 | 9,93 | 0,41 |
| | c | 9,97 | 9,88 | 0,93 |
| | d | 9,96 | 9,91 | 0,51 |
| BR | a | 7,91 | 9,84 | 24,41 |
| | b | 9,97 | 9,49 | 4,84 |
| | c | 9,95 | 9,63 | 3,18 |
| | d | 9,83 | 9,58 | 2,58 |
| OI | a | 9,96 | 9,02 | 9,40 |
| | b | 9,97 | 8,57 | 14,09 |
| | c | 1,12 | 2,00 | 78,80 |
| | d | 9,37 | 6,72 | 28,28 |
| OR | a | 9,96 | 8,58 | 13,83 |
| | b | 9,96 | 8,93 | 10,29 |
| | c | 0,88 | 1,53 | 74,02 |
| | d | 8,70 | 9,02 | 3,74 |
| FGI | a | 0,03 | -0,02 | 166,72 |
| | b | 4,59 | 0,47 | 89,79 |
| | c | 0,01 | 0,14 | 1308,66 |
| | d | 0,04 | 0,23 | 483,70 |
| FGR | a | 0,01 | 0,04 | 321,53 |
| | b | 4,26 | 0,39 | 90,86 |
| | c | 0,03 | 0,04 | 37,32 |
| | d | 0,03 | -0,04 | 243,02 |
| PA | a | 34,00 | 25,39 | 25,32 |
| | b | 37,00 | 26,54 | 28,26 |
| | c | 3,00 | 13,05 | 335,17 |
| | d | 10,00 | 8,17 | 18,32 |
| FA | a | 5,93 | 5,30 | 10,60 |
| | b | 5,93 | 1,75 | 70,49 |
| | c | 0,04 | 3,14 | 7760,38 |
| | d | 4,31 | 4,89 | 13,36 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Mesmo alguns modelos dos emolientes do grupo II tendo $R^2_m > 0,5$, muitos deles tiveram $R^2_{p-y-rand} < 0,5$, indicando alta chance de ajuste ao acaso (Tabela 15). Mesmo que o modelo para Pegajosidade tenha tido $R^2_{cal} > 0,9$, $R^2_{p-y-rand}$ e $R^2_m > 0,5$, o $RMSE_p$ e os

erros percentuais de previsão (Tabela 16) foram elevados. Logo esses modelos não tiveram boa capacidade preditiva para amostras externas à calibração. Assim como ocorrido para os emolientes do grupo I, isso pode ter ocorrido devido ao número pequeno de observações, tanto para calibração e sobretudo para teste.

De forma geral, a aplicação da MLR nos dados do grupo I (n=13, dados teóricos) e do grupo II (n=20, dados instrumentais), não obteve modelos preditivos de boa confiabilidade. Exceto para a propriedade sensorial brilho imediato que pôde ser correlacionada com a polarizabilidade, receptores de ligação de hidrogênio e tensão superficial. A Equação do modelo está representada a seguir (Equação 11):

$$BI = 9,98 - 1,64 \cdot 10^{22} POL + 0,05 RLH + 0,02 \gamma_S \quad (11)$$

Na literatura, Bom *et al.* (2021), conseguiram estabelecer correlações satisfatórias através da MLR com $R^2 = 0,992$, $R_m^2 = 0,983$ e $R_{pred}^2 = 0,994$ (modelo para substitutos do dimethicone). Os parâmetros utilizados foram a viscosidade (especificamente o log da viscosidade), densidade e temperatura média de fusão (para o modelo petrolato). Douguet *et al.* (2017) também obtiveram modelos para espalhabilidade utilizando o log da viscosidade, porém, os autores dividiram os emolientes por classes químicas para aplicar os modelos pela análise PLS. Ainda foi definida a ordem de impacto das propriedades interferentes na espalhabilidade: viscosidade, tensão superficial e densidade (citadas em ordem decrescente). Parente, Gámbaro e Solana (2005), dividiram os emolientes de seus estudos em quatro grupos de acordo com as características sensoriais utilizando a PCA e aplicaram a PLS em cada um. A PLS mostrou que a dificuldade de espalhar, a pegajosidade, maciez e deslizamento estão correlacionados com a viscosidade. Além disso, os autores também chegaram em modelos preditivos para o brilho, oleosidade e resíduo com as variáveis descritivas tensão superficial e a espalhabilidade experimental.

O fato de outros autores obterem resultados satisfatórios pode ser explicada por diferentes motivos: a faixa dos valores das propriedades físico-químicas, a quantidade de amostras disponíveis, a sensibilidade da calibração do painel treinado e as diferenças dos tratamentos das amostras antes de aplicá-las no modelo. A divisão de emolientes por classes químicas ou até mesmo por comportamento sensorial observada na etapa de PCA pode ter sido o diferencial nesses trabalhos, uma vez que no presente trabalho os dados foram agrupados de acordo com a disponibilidade de dados e não com a característica de cada classe/grupos. A falta da divisão dos dados aliada ao pequeno número de amostras

para se realizar a calibração e posterior predição podem ter acarretado diversas carências nos modelos preditivos.

5.2 Modelos classificatórios por LDA

As intensidades dos atributos sensoriais, originalmente expressas como variáveis contínuas, foram convertidas em três classes conforme Tabela 17: baixo, médio e alto. Essas categorias de intensidade foram então usadas como respostas a serem preditas em modelos classificatórios obtidos por LDA. Todos os dados referentes aos atributos brilho imediato e residual de ambos grupos encaixaram na categoria 3, e, portanto, não foram incluídos nas análises.

Tabela 17 – Classificação dos atributos sensorial em classes 1,2 e 3.

| Categoria | 1 (Baixo) | 2 (Médio) | 3 (Alto) |
|-----------|-----------|-----------|----------|
| E | 0-3,8 | 3,8-6,80 | 6,8-10 |
| D | 0-3,8 | 3,8-6,80 | 6,8-10 |
| P | 0-3 | 4 - 6 | 7 - 10 |
| FA | 0-3 | 4 - 7 | 8 - 10 |
| TS | <0,5 | 0,2 - 0,4 | 0 - 0,2 |
| BI | <5 | 5 - 6 | >7 |
| BR | <5 | 5 - 6 | >7 |
| OI | <5 | 6 - 7 | >7 |
| OR | <5 | 6 - 7 | >7 |
| FGI | <1 | 1 - 4 | >4 |
| FGR | <1 | 1 - 4 | >4 |
| PA | >25 | 11 - 24 | <10 |

Fonte: da autora (2021). Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Os parâmetros de desempenho dos modelos obtidos são apresentados nas Tabelas 18 e 19 (as tabelas com todos os dados estão nos Apêndices de H a I).

Tabela 18 – Porcentagem de classificações corretas do LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo I.

| Atributo Sensorial | Classe | Calibração (%) | Randomização de y (%) | Validação Cruzada (%) | Teste (%) |
|--------------------|--------|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------|
| E | Global | 100,00 | 95,00 | 60,00 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 94,44 | 66,67 | 100,00 |
| D | Global | 100,00 | 91,00 | 60,00 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 90,00 | 66,67 | 100,00 |
| P | Global | 100,00 | 94,00 | 80,00 | 66,67 |
| | 1 | 100,00 | 93,33 | 88,89 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| FA | Global | 100,00 | 91,00 | 60,00 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | 2 | 100,00 | 90,00 | 66,67 | 100,00 |
| TS | Global | 50,00 | 64,00 | 20,00 | 0,00 |
| | 1 | 75,00 | 65,00 | 50,00 | 0,00 |
| | 2 | 33,33 | 53,33 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 33,33 | 73,33 | 0,00 | 0,00 |
| OI | Global | 100,00 | 94,00 | 60,00 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 93,33 | 66,67 | 100,00 |
| OR | Global | 100,00 | 90,00 | 60,00 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 88,89 | 66,67 | 100,00 |
| FGI | Global | 100,00 | 91 | 60 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 90,00 | 66,67 | 100,00 |
| | 2 | 100,00 | 100 | 0 | 100,00 |
| FGR | Global | 100,00 | 92 | 60 | 100,00 |
| | 1 | 100,00 | 91,11 | 66,67 | 100,00 |
| | 2 | 100,00 | 100 | 0 | 100,00 |
| PA | Global | 100,00 | 91,00 | 60,00 | 33,33 |
| | 1 | 100,00 | 90,00 | 66,67 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | - | - | - | 0,00 |

Fonte: da autora (2021). Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Os atributos sensoriais espalhabilidade, deslizamento, filme aveludado, oleosidade residual, filme gorduroso imediato, filme gorduroso residual, apresentaram altos índices de acerto, alcançando 100% para a calibração e predição. Porém, na etapa

de validação cruzada, a porcentagem de acertos foi menor, chegando a zero para a classe com menor quantidade de amostras. Além disso, o nível de acertos no teste de randomização de y foi tão elevado quanto na calibração, indicando que o ajuste (% de acertos elevada na calibração) foi ao acaso.

Tabela 19 – Porcentagem de acertos dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II.

(continua).

| Atributo Sensorial | Classe | Calibração (%) | Randomização de y (%) | Validação Cruzada (%) | Teste (%) |
|--------------------|--------|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------|
| E | Global | 93,75 | 88,75 | 81,25 | 2,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | 0,00 | 80,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 100,00 | 88,57 | 92,86 | 2,00 |
| D | Global | 93,75 | 88,75 | 81,25 | 2,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | 0,00 | 70,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 100,00 | 89,29 | 92,86 | 2,00 |
| P | Global | 100,00 | 93,75 | 87,50 | 75,00 |
| | 1 | 100,00 | 93,33 | 93,33 | 100,00 |
| | 3 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| FA | Global | 93,75 | 89,38 | 87,50 | 50,00 |
| | 1 | 50,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | 100,00 | 87,86 | 100,00 | 66,67 |
| TS | Global | 56,25 | 66,88 | 43,75 | 75,00 |
| | 1 | 60,00 | 70,00 | 40,00 | 100,00 |
| | 2 | 0,00 | 46,67 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 75,00 | 72,50 | 62,50 | 100,00 |
| OI | Global | 93,75 | 89,38 | 87,50 | 50,00 |
| | 1 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | 0,00 | 70,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 100,00 | 90,00 | 100,00 | 100,00 |
| OR | Global | 87,50 | 83,13 | 81,25 | 50,00 |
| | 1 | 0,00 | 90,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 2 | 50,00 | 85,00 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 100,00 | 82,31 | 100,00 | 100,00 |
| FGI | Global | 81,25 | 82,50 | 81,25 | 50,00 |
| | 1 | 92,31 | 81,54 | 92,31 | 100,00 |
| | 2 | 50,00 | 85,00 | 50,00 | 0,00 |
| | 3 | 0,00 | 90,00 | 0,00 | 0,00 |

Tabela 19 – Porcentagem de acertos dos modelos LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-químicos dos emolientes do grupo II.

(conclusão).

| Atributo Sensorial | Classe | Calibração (%) | Randomização de y (%) | Validação Cruzada (%) | Teste (%) |
|--------------------|--------|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------|
| FGR | Global | 93,75 | 84,38 | 93,75 | 75,00 |
| | 1 | 100,00 | 83,85 | 100,00 | 100,00 |
| | 2 | 100,00 | 90,00 | 100,00 | 100,00 |
| | 3 | 0,00 | 80,00 | 0,00 | 0,00 |
| PA | Global | 75,00 | 63,13 | 37,50 | 75,00 |
| | 1 | 100,00 | 62,22 | 66,67 | 100,00 |
| | 2 | 50,00 | 52,50 | 0,00 | 0,00 |
| | 3 | 33,33 | 80,00 | 0,00 | 100,00 |

Fonte: da autora (2021). Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

Da mesma forma que o grupo I, nenhum dos modelos de classificação do grupo II teve boa qualidade, pois o nível de acertos no teste de randomização de y foi tão elevado quanto na calibração. Isto significa que o ajuste (% de acertos elevada na calibração) foi ao acaso. Além disso, as classes contendo uma menor quantidade de amostras em cada atributo sensorial, apresentam a porcentagem de acertos iguais a 0% para a validação cruzada, uma vez que a natureza do teste consiste em excluir uma amostra por vez do grupo de calibração e em seguida construir o modelo novamente para testar com a amostra eliminada.

A LDA aplicada aqui baseou-se na hipótese de que um classificador linear poderia capturar informações que são úteis para fins de classificação das propriedades sensoriais de um emoliente. Porém, o fato de as classes possuírem uma distribuição não uniforme, ou seja, poucos valores para uma classe e mais valores para outras, levou a construção de modelos com alta porcentagem de acertos ao acaso.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, vinte e três emolientes foram caracterizados nos quesitos sensoriais e físico-químicos para estabelecer modelos matemáticos de predição sensorial. Em tal estudo, foram investigados atributos sensoriais como espalhabilidade, deslizamento, pegajosidade, filme residual, toque seco, brilho, oleosidade e absorção na pele. Concomitantemente, experimentos relacionados às características físico-químicas dos emolientes foram realizados para a determinação da tensão superficial e interfacial, índice de refração, densidade e viscosidade. Além disso, propriedades teóricas como peso molecular, polarizabilidade, superfície polar, receptores de hidrogênio, log P e tensão superficial, também foram investigadas em bancos de dados para alimentar o trabalho. Apenas para o atributo brilho imediato, a MLR apresentou parâmetros de performance aceitáveis, tendo como suas variáveis descritoras a polarizabilidade, receptores de hidrogênio e a tensão superficial. Ainda que os outros modelos tenham alcançado parâmetros bons estatisticamente, os mesmos não portaram boa capacidade preditiva para amostras externas à calibração. Isso pode ter ocorrido devido ao número pequeno de observações, tanto para calibração e sobretudo para teste. Os valores dos atributos sensoriais obtidos pelo painel treinado nesse trabalho, em sua maior parte, estão em valores extremos (mínimo ou máximo), acarretando limitações no desenvolvimento de modelos de natureza univariada ou multivariada. Tal comportamento (de extremos) pode ser explicado pela metodologia usada pelo painel treinado, o qual talvez ainda não está sensível às amostras estudadas (os emolientes). Uma alternativa plausível, seria incluir emolientes que apresentem valores sensoriais intermediários aos extremos observados, diminuindo a deficiência nos dados. Portanto, com este estudo não foi possível estabelecer modelos confiáveis para todos os atributos sensoriais dos emolientes abordados aqui de acordo com seus parâmetros físico-químicos. Porém, este trabalho trilha um caminho para futuras investigações, onde corrigindo as limitações encontradas, modelos preditivos com confiabilidade e capacidade de predição mais elevadas possam ser obtidos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA. **RESOLUÇÃO-RDC Nº 42 - Ministério da Saúde**. [S. l.], 2010. Governamental. Disponível em: https://bvsms.saude.gov.br/bvs/saudelegis/anvisa/2010/res0042_25_10_2010.html. Acesso em: 27 mar. 2021.
- ALANDER, J. T. Chemical and Physical Properties of Emollients. *In*: LODÉN, M.; MAIBACH, H. I. (org.). **Treatment of Dry Skin Syndrome: The Art and Science of Moisturizers**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012. p. 399–417. *E-book*. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-3-642-27606-4_26.
- ALANDER, J. **The function of emollients in skin care**. [S. l.: s. n.], 2019.
- ANSALDI, A.; LABA, D. **The next generation of hydrocarbon-based cosmetic fluids**. [S. l.], 2007. Educacional. Disponível em: https://www.cosmeticsbusiness.com/technical/article_page/The_next_generation_of_hydrocarbonbased_cosmetic_fluids/47668. Acesso em: 6 jun. 2021.
- ASHBY, M. F.; JONES, D. R. H. Chapter 28 - Friction and Wear. *In*: ASHBY, M. F.; JONES, D. R. H. (org.). **Engineering Materials 1 (Fourth Edition)**. Fourth Edition. Boston: Butterworth-Heinemann, 2012. p. 417–430. *E-book*. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080966656000283>.
- BARBOSA, L. C. de A. **Introdução à Química Orgânica**. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2011. v. 1
- BARROS, C. **Diferença entre álcoois graxos | in-cosmetics Connect**. [S. l.], 2021. Educacional. Disponível em: <https://connect.in-cosmetics.com/pt/formulacoes/diferenca-entre-alcoois-graxos/>. Acesso em: 7 jun. 2021.
- BERKEY, C. *et al.* **Emollient structure and chemical functionality effects on the biomechanical function of human stratum corneum**. **INTERNATIONAL JOURNAL OF COSMETIC SCIENCE**, 2020.
- BISPO, E. da S. **Processo de alcalinização dos nibs de cacau (*Theobroma cacao* L.) e avaliação da qualidade do pó**. 1999. Doutorado - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1999. Disponível em: <http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/254418>. Acesso em: 17 out. 2021.
- BOM, S. *et al.* A mathematical modeling strategy to predict the spreading behavior on skin of sustainable alternatives to personal care emollients. **Colloids and Surfaces B: Biointerfaces**, [s. l.], v. 205, p. 111865, 2021.
- BOUWSTRA, J. A. *et al.* The lipid organisation in the skin barrier. **Acta dermatovenereologica. Supplementum**, Norway, v. 208, p. 23–30, 2000.
- BRASEQ. **Medidor de tensão superficial - BrasEq**. [S. l.], 2021. Vendas. Disponível em: <https://www.braseq.com.br/medidor-tensao-superficial>. Acesso em: 18 out. 2021.
- BRUNS, R.; FAIGLE, J. F. G. Química Nova. **Quimiometria**, [s. l.], p. 84:97, 1984.

CALIXTO, L. S.; CAMPOS, P. M. B. G. M. Physical–Mechanical characterization of cosmetic formulations and correlation between instrumental measurements and sensorial properties. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 39, n. 5, p. 527–534, 2017.

CANTO, E. L. **Informe-se sobre a Química - O que é coeficiente de partição?**. [S. l.: s. n.], 2016. Disponível em: http://professorcanto.com.br/boletins_qui/055.pdf. Acesso em: 12 out. 2021.

CARVALHO, A. C. de O. **Características físico-químicas de óleos vegetais comestíveis puros e adulterados**. 2017. 79 f. Monografia - Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes, 2017.

ÇENGEL, Y.; CIMBALA, J. **Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e Aplicações**. 2. ed. [S. l.]: AMGH, 2015. v. 1

CHANG, R.; GOLDSBY, K. A. **Química geral: conceitos essenciais**. 11. ed. Porto Alegre: AMGH, 2013. v. 1

CHAO, C. *et al.* Emollients for cosmetic formulations: Towards relationships between physico-chemical properties and sensory perceptions. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, [s. l.], v. 536, p. 156–164, 2018a.

CHAO, C. *et al.* Emollients for cosmetic formulations: Towards relationships between physico-chemical properties and sensory perceptions. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, [s. l.], v. 536, Special issue on Formula VIII, p. 156–164, 2018b.

CHEMSPIDER | SEARCH AND SHARE CHEMISTRY. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <http://www.chemspider.com/>. Acesso em: 29 out. 2021.

COLAS, A. Silicones: preparation, properties and performance. **Dow Corning, Life Sciences**, [s. l.], 2005.

COSTA, N. *et al.* Planejamento de programas de reciclagem de resíduos de construção e demolição no Brasil: uma análise multivariada. **Engenharia Sanitaria E Ambiental - ENG SANIT AMBIENT**, [s. l.], v. 12, 2007.

COX, K.; REUSSER, D. **Polarizability**. [S. l.], 2013. Disponível em: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Intermolecular_Forces/Specific_Interactions/Polarizability](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Intermolecular_Forces/Specific_Interactions/Polarizability). Acesso em: 12 out. 2021.

DEDEREN, J. C.; CHAVAN, B.; RAWLINGS, A. V. Emollients are more than sensory ingredients: the case of Isostearyl Isostearate. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 34, n. 6, p. 502–510, 2012.

DIAS, D. L. **O que é éster?**. [S. l.], 2021. Educacional. Disponível em: <https://brasilescola.uol.com.br/o-que-e/quimica/o-que-e-ester.htm>. Acesso em: 19 maio 2021.

DOUGUET, M. *et al.* **Spreading properties of cosmetic emollients: Use of synthetic skin surface to elucidate structural effect.** **COLLOIDS AND SURFACES B-BIOINTERFACES**, 2017.

ERTL, P. Polar Surface Area. *In*: **MOLECULAR DRUG PROPERTIES**. [S. l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2007. p. 111–126. *E-book*. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9783527621286.ch5>.

EUCERIN. **Eucerin: Sobre a pele**. [S. l.], 2021. Disponível em: <https://www.eucerin.com.br/sobre-pele/conhecimentos-basicos-sobre-a-pele/estrutura-e-funcoes-da-pele>. Acesso em: 27 jun. 2021.

EUROPEAN COMMISSION. **CosIng - Cosmetics - GROWTH - European Commission**. [S. l.], 2020. Disponível em: <https://ec.europa.eu/growth/tools-databases/cosing/>. Acesso em: 27 mar. 2021.

FERNANDES, S.; BALA, J. Performance Analysis of PCA-based and LDA-based Algorithms for Face Recognition. **International Journal of Signal Processing Systems**, [s. l.], v. 1, p. 1–6, 2013.

FERREIRA, M. M. C. *et al.* Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial. **Química Nova**, [s. l.], v. 22, p. 724–731, 1999.

FONTANA, É. **Determinação da Viscosidade de Fluidos Newtonianos**. [S. l.]: UFSC, 2018. Disponível em: https://fontana.paginas.ufsc.br/files/2018/08/viscosímetros_newtoniano.pdf. Acesso em: 20 out. 2021.

FOTHERINGHAM, U. *et al.* Optical Glass: Challenges From Optical Design. *In*: POMEROY, M. (org.). **Encyclopedia of Materials: Technical Ceramics and Glasses**. Oxford: Elsevier, 2021. p. 658–675. *E-book*. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128185421000850>.

FOX, R.; MCDONALD, A.; PRITCHARD, P. **Introdução a Mecânica dos Fluidos**. 8. ed. [S. l.]: LTC, 2014.

FRANQUILINO, E. Temática Silicones em Cosméticos. **A química dos Silicones**, [s. l.], n. Temática, 2011.

HIBBLER, R. C. **Mecânica dos fluidos**. 1. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2016.

JUNQUEIRA, L. C. U.; CARNEIRO, J. **Histologia básica**. 12. ed. Rio de Janeiro, RJ: Guanabara Koogan, 2013. v. 1.

KAORI, L. Você sabe o que é Análise Sensorial? *In*: FARMA JUNIOR. 18 fev. 2019. Disponível em: <https://www.farmajunior.com.br/alimentos/voce-sabe-o-que-e-analise-sensorial/>. Acesso em: 10 out. 2021.

LEE, J. D. **Química Inorgânica não tão Concisa**. 1. ed. [S. l.]: Blucher, 1999. v. 1

- LUKIC, M. *et al.* A combined approach in characterization of an effective w/o hand cream: the influence of emollient on textural, sensorial and in vivo skin performance. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 34, n. 2, p. 140–149, 2012.
- MAIA CAMPOS, P.; GARCIA MERCÚRIO, D. Cosmetics & Toiletries Brasil. **Formas Cosméticas (Série Fundamentos da Cosmetologia)**, [s. l.], v. 25, p. 36 a 40, 2014.
- MALYSHEV, V. N. 8 - Tribological aspects in friction stir welding and processing. *In*: GIVI, M. K. B.; ASADI, P. (org.). **Advances in Friction-Stir Welding and Processing**. [S. l.]: Woodhead Publishing, 2014. (Woodhead Publishing Series in Welding and Other Joining Technologies). p. 329–386. *E-book*. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780857094544500082>.
- MARKS, R. **Emollients**. 1. ed. London: CRC Press, 1997. v. 1
- MASAKI, K.; TOTANI, N. The evaluation of oily components by using the frictional feel analyzer. **Journal of Society of Cosmetic Chemists of Japan**, [s. l.], v. 32, n. 1, p. 59–64, 1998.
- MAXON, B.; STARCH, M. Formulating Skin Care Products with Silicones: Approaches and Strategies. *In*: **HANDBOOK OF FORMULATING DERMAL APPLICATIONS**. [S. l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2016. p. 59–114. *E-book*. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9781119364221.ch4>. Acesso em: 6 jun. 2021.
- MIYAHARA, R. Emollients. *In*: **COSMETIC SCIENCE AND TECHNOLOGY: THEORETICAL PRINCIPLES AND APPLICATIONS**. [S. l.: s. n.], 2017. p. 245–253.
- MORAVKOVA, T.; FILIP, P. Relation between sensory analysis and rheology of body lotions. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 38, n. 6, p. 558–566, 2016.
- MORELLATO, S. A. Modelos de regressão PLS com erros heteroscedásticos. [s. l.], 2010. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/4541>. Acesso em: 25 out. 2021.
- MOUAD, A. M.; PORTO, A. L. M. Uma abordagem química sobre a pele e a biocatálise no desenvolvimento de moléculas antioxidantes de aplicação cosmética. **Revista Virtual de Química**, [s. l.], 2014.
- NUNES, C. A. *et al.* Chemoface: a novel free user-friendly interface for chemometrics. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, [s. l.], v. 23, p. 2003–2010, 2012.
- O'LENICK, A. J. Silicones—basic chemistry and selected applications. **Journal of Surfactants and Detergents**, [s. l.], v. 3, n. 2, p. 229–236, 2000.
- PARENTE, M. E.; GÁMBARO, A.; ARES, G. SENSORY CHARACTERIZATION OF EMOLLIENTS. **Journal of Sensory Studies**, [s. l.], v. 23, n. 2, p. 149–161, 2008.

PARENTE, M. E.; GÁMBARO, A.; SOLANA, G. Study of sensory properties of emollients used in cosmetics and their correlation with physicochemical properties. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 27, n. 6, p. 354–354, 2005.

PEREIRA, A. da S.; MANOSSO, T. W. S.; FOSSATI, E. C. **Regressão Linear Múltipla Como simplificar por meio do Excel e SPSS?**. [S. l.]: UPF, 2019. Disponível em: https://www.upf.br/_uploads/Conteudo/cepeac/textos-discussao/texto-01-2019.pdf. Acesso em: 18 out. 2021.

PONTES, M. J. C. de. **Algoritmo das projeções sucessivas para seleção de variáveis espectrais em problemas de classificação**. 2009. Doutorado - UFPB/J.P./QUÍMICA, [s. l.], 2009. Disponível em: http://www.dominiopublico.gov.br/pesquisa/DetalheObraForm.do?select_action=&co_obra=133543. Acesso em: 18 out. 2021.

PRATIM ROY, P. *et al.* On two novel parameters for validation of predictive QSAR models. **Molecules (Basel, Switzerland)**, [s. l.], v. 14, n. 5, p. 1660–1701, 2009.

PROTIL, R. M.; SILVA, W. V. da S. Utilização Da Função De Análise Discriminante Linear E O Modelo De Regressão Logística Na Previsão De Insolvência De Cooperativas Agrícolas Do Estado Do Paraná. *In*: SOCIEDADE BRASILEIRA DE ECONOMIA, ADMINISTRACAO E SOCIOLOGIA RURAL (SOBER), 2006, Fortaleza. **Questões Agrárias, Educação no Campo e Desenvolvimento**. Fortaleza: [s. n.], 2006.

RÉGINER, B. M.; PÉRIUS, L. S.; CARMO, L. C. L. do C. Reômetro – BIOPOL. *In*: BIOPOL. 2020. Disponível em: <http://www.biopol.ufpr.br/equipamentos/reometro-2/>. Acesso em: 18 out. 2021.

REZENDE, A. C. B.; FILHO, G. L.; VIEIRA, F. H. T. Aplicação da Análise Discriminante Linear (LDA) para Classificação de Sinais Eletromiográficos (EMG) de Movimentos da Mão. *In*: ANAIS DA VII ESCOLA REGIONAL DE INFORMÁTICA DE GOIÁS, 2019. **Anais da Escola Regional de Informática de Goiás (ERI-GO)**. [S. l.]: SBC, 2019. p. 351–360. Disponível em: <https://sol.sbc.org.br/index.php/erigo/article/view/9111>. Acesso em: 16 out. 2021.

RODRIGUES, V. ANÁLISE DESCRITIVA: COMPARAÇÃO ENTRE METODOLOGIAS. *Inst. Latic*, 2010. p. 41:48.

S. CLEMENTE, G. Comparative study of experimental and computational procedures for the calculation of molecular lipophilicity. **Saúde & Tecnologia**, [s. l.], v. 5, p. 29–34, 2011.

SAHLE, F. F. *et al.* Skin Diseases Associated with the Depletion of Stratum Corneum Lipids and Stratum Corneum Lipid Substitution Therapy. **Skin Pharmacology and Physiology**, [s. l.], v. 28, n. 1, p. 42–55, 2015.

SAVARY, G.; GRISEL, M.; PICARD, C. **Impact of emollients on the spreading properties of cosmetic products: A combined sensory and instrumental characterization**. **COLLOIDS AND SURFACES B-BIOINTERFACES** PO BOX 211, 1000 AE AMSTERDAM, NETHERLANDSELSSEVIER SCIENCE BV, , 2013.

- SILVA, J. P. F. da; MACEDO, A. I. **Análise Discriminante Linear**. [S. l.]: LAMFO/UnB, 2021. Disponível em: <https://lamfo.unb.br/wp-content/uploads/2020/12/An%C3%A1lise-Discriminante-Linear.pdf>. Acesso em: 20 out. 2021.
- SIMÕES, S. da S. **Desenvolvimento de métodos validados para a determinação de captopril usando espectrometria NIR e calibração multivariada**. 2008. Doutorado - Universidade Federal da Paraíba, Paraíba, 2008. Disponível em: http://www.dominiopublico.gov.br/pesquisa/DetalheObraForm.do?select_action=&co_obra=104889. Acesso em: 16 out. 2021.
- SINAISKI, E. G.; LAPIGA, E. J. **Separation of multiphase, multicomponent systems**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2007.
- SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química Orgânica**. 7. ed. [S. l.]: LTC, 2001. v. 1
- SOUZA, S. G. **Um estudo sobre a evolução das câmaras de combustão dos motores do ciclo Otto à gasolina e sua aplicação ao etanol hidratado como combustível alternativo**. 2004. Mestrado - Universidade de São Paulo, Escola de Engenharia de São Carlos, 2004. Disponível em: Acesso em: 12 out. 2021.
- SPECIALCHEM. **CYCLOPENTASILOXANE - Cosmetic Ingredient (INCI)**. [S. l.], 2021a. Disponível em: <https://cosmetics.specialchem.com/inci/cyclopentasiloxane>. Acesso em: 7 jun. 2021.
- SPECIALCHEM. **OCTYLDODECANOL - Cosmetic Ingredient (INCI)**. [S. l.], 2021b. Disponível em: <https://cosmetics.specialchem.com/inci/octyldodecanol>. Acesso em: 7 jun. 2021.
- STRUCTURE DRAWING SOFTWARE FOR ACADEMIC AND PERSONAL USE | ACD/CHEMSKETCH. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>. Acesso em: 29 out. 2021.
- TEIXEIRA, L. V. Análise sensorial na indústria de alimentos. **Revista do Instituto de Laticínios Cândido Tostes**, [s. l.], v. 64, n. 366, p. 12–21, 2009.
- TERESCENCO, D. *et al.* Influence of the emollient on emulsions containing lamellar liquid crystals: from molecular organization towards applicative properties. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 40, n. 6, p. 565–574, 2018.
- VARELLA, C. A. A. **Análise de Componentes Principais**. 2008. Pós-Graduação - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica - RJ, 2008. Disponível em: <http://www.ufrj.br/institutos/it/deng/varella/Downloads/multivariada%20aplicada%20a%20s%20ciencias%20agrarias/Aulas/analise%20de%20componentes%20principais.pdf>. Acesso em: 25 out. 2021.
- VOLATILIDADE QUÍMICA: O QUE É, EXEMPLOS E EXERCÍCIOS. *In*: CURSO ENEM GRATUITO. 2 jul. 2020. Disponível em: <https://cursoenemgratuito.com.br/volatilidade-quimica/>. Acesso em: 12 out. 2021.

WEBER, S. *et al.* Quantification of Mineral Oil Aromatic Hydrocarbons (MOAH) in Anhydrous Cosmetics Using ¹H NMR. **Journal of Chemistry**, [s. l.], v. 2019, p. 1680269, 2019.

WIECHERS, J. W. *et al.* Formulating for efficacy1. **International Journal of Cosmetic Science**, [s. l.], v. 26, n. 4, p. 173–182, 2004.

WILSON, F.; LOUGHRAN, Dani. The link between function and structure of esters. **The link between function and structure of esters**, [s. l.], p. 4, 2017.

YOUNG, H.; FREEDMAN, R. **Física IV - Ótica e Física Moderna**. 14. ed. [S. l.]: Pearson, 2016. v. 4

APÊNDICE A – Metodologia dos dados instrumentais

Densidade

Materiais Utilizados

- Densímetro Digital da marca Metler Toledo DMA48;
- Seringas plásticas;
- Água desmineralizada;
- Álcool Etílico;
- Detergente neutro.

Procedimento Experimental

1. Ligar o densímetro;
2. Realizar a calibração do equipamento com ar e água com auxílio da seringa, no visor acionar “ajuste” e “iniciar”;
3. Injetar novamente a seringa com ar no densímetro até secar o capilar;
4. Leitura da viscosidade da amostra: No visor, selecionar “VISC” e “Iniciar”. Logo após adicionar a amostra com a seringa até o preenchimento total do capilar.
5. Esperar o resultado no visor do equipamento e retirar a seringa;
6. Realizar a limpeza, injetando aproximadamente 5 ml de água, detergente e álcool, um de cada vez. Por fim, injetar ar até secar o máximo possível o capilar.

Índice de Refração

Materiais Utilizados

- Refratômetro Digital da marca Metler Toledo, modelo RED40D;
- Pipetas;
- Papel absorvente;
- Álcool Etílico.

Procedimento Experimental

1. Ligar o refratômetro e conferir se está devidamente calibrado pelo visor;
2. Definir a temperatura da medição. No caso do presente trabalho, igual a 20°C;
3. Abrir a tampa esquerda do equipamento e com auxílio de uma pipeta e adicionar a amostra no prisma até o risco indicado (garantir que não tenha bolhas de ar que, pois, estas interferem no resultado);
4. Fechar a tampa e apertar a tecla *measure*;
5. Esperar o resultado no visor do equipamento e anotar;
6. Realizar a limpeza com auxílio de álcool e papel absorvente.

Teor de voláteis

Materiais Utilizados

- Balança de umidade da marca Metler Toledo, modelo H38 Halogen;
- Pipetas;
- Prato de alumínio.

Procedimento Experimental

1. Ligar a balança (Figura 20);
2. Definir o método da análise. No caso do presente trabalho: método “Standard Method”, onde a amostra é aquecida até a temperatura selecionada (40°C) e mantida durante o tempo de análise pré-selecionado (3 minutos);
3. Tarar a balança em “0/T”. Logo após, com a ajuda de uma pipeta pesar aproximadamente 1g e anotar a massa inicial.
4. Iniciar a medida apertando a tecla \updownarrow ;
5. Esperar o resultado no visor do equipamento e anotar a massa final;
6. Descartar o prato de alumínio.

Coefficiente de fricção

Materiais Utilizados

- Reômetro Discovery, modelo HR20;
- Chaves de fenda;
- Alicates
- Geometria 4 balls;

Procedimento Experimental

1. Primeiramente, acionar todos os componentes do reômetro: cabeçote, válvula de gás, CPU e o banho;
2. Retirar a trava da parte superior do cabeçote;
3. Inicialmente, calibrar o equipamento sem geometria: o equipamento é controlado através do software TRIOS e é através de tal software que se inicia as etapas de calibração na seção “*calibration*” do programa;
4. Montar a geometria (para o cálculo do coeficiente de fricção a geometria 4 balls foi escolhida) com ajuda das chaves de fenda: encaixar na parte superior do cabeçote a geometria mais comprida com uma bolinha na ponta e na parte inferior encaixar o cilindro com três bolinhas com auxílio dos alicates (Figura 21);
5. Selecionar a geometria utilizada no software e calibrar o equipamento com a geometria;
6. Selecionar a função “*Zero gap*” no software (assim, equipamento reconhece a localização da base);
7. Colocar a amostra avaliada na parte inferior do cabeçote de modo a preencher todo o espaço vazio do cilindro;
8. Manualmente, através do visor do equipamento no cabeçote apertar a tecla “↓” até a parte superior da geometria atingir o valor de 2N;
9. No software TRIOS, selecionar “*start*”. O resultado é salvo automaticamente.
10. O valor do coeficiente foi então obtido através das médias dos valores capturados pelo equipamento em 60s. O experimento foi realizado em duplicata para todos os emolientes.

Viscosidade

Materiais Utilizados

- Reômetro Híbrido Discovery, modelo HR-3;
- Pipetas;
- Alicates.

Procedimento Experimental

1. Primeiramente, acionar todos os componentes do reômetro: cabeçote, válvula de gás, CPU e o banho;
2. Calibrar o equipamento sem geometria: o equipamento é controlado através do software TRIOS e é através de tal ferramenta que se inicia as etapas de calibração;
3. Encaixar a geometria escolhida (para o presente trabalho a geometria de placas foi a mais adequada);
4. Calibrar o equipamento com a geometria;
5. Adicionar a amostra com o auxílio da pipeta;
6. Selecionar a função “Zero gap” no software (assim, equipamento reconhece a localização da base);
7. Selecionar a função “Geometry gap” no software (assim, a geometria consegue atingir a altura adequada para começar a análise);
8. No software TRIOS, selecionar “start”. O resultado é salvo automaticamente.
9. A viscosidade foi então obtida pela média da duplicata dos valores encontrados pelas curvas de fluxo.

Tensão Superficial e Interfacial

Materiais Utilizados

- Tensiômetro digital modelo DCAT-11;
- Place de Wilhelmy;

- Microbalança;
- Banho termostático.

Procedimento Experimental

Os valores de tensão superficial e tensão interfacial foram determinados experimentalmente através do método da placa de Wilhelmy. Os ensaios foram conduzidos em temperatura controlada de 25 °C, obtida com o emprego de um banho termostático.

Tensão Superficial

A Tensão superficial foi calculada entre o emoliente e ar.

1. Inserir a amostra em um recipiente de vidro do emoliente na cavidade do estágio móvel do tensiômetro;
2. Movimentar o estágio para cima, deixando a superfície da amostra a poucos milímetros abaixo da placa de platina-irídio que possui uma microbalança previamente fixada;
3. Iniciar a análise no software do equipamento: estágio é movimentado para cima novamente, com a placa tocando a superfície do líquido (o equipamento registra como a posição inicial da análise). O movimento ascendente continua molhando a placa totalmente até atingir 3 mm de profundidade. Após atingir tal profundidade, o estágio retorna à posição inicial e o equipamento registra a força exercida pela superfície da amostra sobre a placa de platina-irídio.

A determinação do valor de tensão superficial considera a média aritmética dos cinquenta últimos pontos experimentais registrados.

Tensão Interfacial

A tensão interfacial foi calculada entre o emoliente (menor densidade) e a água (maior densidade). O experimento foi realizado em três etapas:

- Primeira etapa: Medir o empuxo da placa de Wilhelmy (posteriormente, esse valor é descontado, sendo medida apenas as forças provenientes da ação da água que

toca a placa na interface dos líquidos) no líquido de menor densidade, analogamente aos passos 1-3 do experimento da tensão superficial;

- Segunda Etapa: Detectar a superfície do líquido de maior densidade. Para isso, água é colocada em um recipiente de vidro e inserida no estágio móvel do tensiometro. Novamente, o estágio é posicionado alguns milímetros abaixo da placa de platina-irídio. Após a medida ser iniciada no software, o estágio é movimentado para cima fazendo com que a placa detecte e memorize a superfície do líquido (posição zero) e seja parcialmente submersa. O estágio é então movimentado de forma descendente e estaciona na posição zero;
- Terceira etapa: Medir a tensão interfacial entre os dois líquidos. De maneira cuidadosa, a amostra de emoliente é adicionada ao recipiente de vidro da segunda etapa. A adição é feita até que a superfície da amostra de emoliente fique cerca de 2 mm acima da extremidade superior da placa de platina-irídio.

Após a completa adição da amostra, a medida é iniciada no software do equipamento. Igualmente ao experimento da tensão superficial, a determinação do valor de tensão interfacial considera a média aritmética dos cinquenta últimos pontos experimentais registrados.

APÊNDICE B – Desvio padrão das Intensidades Médias dos atributos sensoriais

| Emoliente | E | D | P | FA | TS | BI | BR | OI | OR | FGI | FGR | PA |
|--------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| IP | 0,03 | 0,03 | 0,02 | 1,37 | 0,51 | 0,14 | 0,42 | 0,40 | 0,47 | 0,13 | 0,10 | 3,99 |
| DE | 0,03 | 0,04 | 0,01 | 1,38 | 0,62 | 0,27 | 0,45 | 0,44 | 0,63 | 0,05 | 0,03 | 4,11 |
| II | 0,11 | 0,09 | 0,02 | 1,25 | 0,61 | 0,14 | 0,39 | 0,41 | 0,60 | 0,09 | 0,04 | 4,96 |
| PC | 1,58 | 1,58 | 0,02 | 1,34 | 0,53 | 1,56 | 1,63 | 1,59 | 1,68 | 0,08 | 0,04 | 7,11 |
| CCT | 1,53 | 1,49 | 0,03 | 1,31 | 0,53 | 1,63 | 1,57 | 1,69 | 1,65 | 0,15 | 0,13 | 5,94 |
| O | 0,29 | 0,39 | 0,07 | 0,91 | 0,55 | 0,02 | 0,28 | 0,38 | 0,48 | 0,06 | 0,06 | 5,74 |
| CO | 0,29 | 0,57 | 0,09 | 1,07 | 0,56 | 0,07 | 0,40 | 0,12 | 0,38 | 0,22 | 0,19 | 6,16 |
| HO | 1,61 | 1,59 | 0,17 | 1,47 | 0,54 | 1,57 | 1,59 | 1,52 | 1,53 | 0,39 | 0,28 | 6,55 |
| DM | 0,51 | 0,52 | 1,64 | 0,49 | 0,10 | 1,62 | 1,59 | 0,89 | 0,83 | 2,02 | 2,06 | 1,43 |
| TC | 0,29 | 0,26 | 0,24 | 0,36 | 0,15 | 0,75 | 0,84 | 0,77 | 0,80 | 0,87 | 1,16 | 1,05 |
| C | 0,41 | 0,41 | 0,02 | 0,64 | 0,37 | 0,33 | 0,65 | 0,76 | 1,07 | 0,03 | 0,02 | 5,93 |
| EO | 0,25 | 0,29 | 0,02 | 0,39 | 0,32 | 0,18 | 0,55 | 0,50 | 0,73 | 0,08 | 0,02 | 6,30 |
| ICCAI CC | 0,37 | 0,39 | 0,03 | 0,55 | 0,12 | 0,21 | 0,62 | 0,45 | 0,49 | 0,02 | 0,02 | 6,71 |
| ILPG D | 0,30 | 0,28 | 0,02 | 0,64 | 0,44 | 0,36 | 0,54 | 0,57 | 0,99 | 0,02 | 0,02 | 4,24 |
| DD | 0,39 | 0,38 | 0,02 | 0,48 | 0,38 | 0,50 | 0,88 | 0,68 | 0,91 | 0,01 | 0,02 | 4,84 |
| D350 | 0,34 | 0,41 | 0,64 | 0,62 | 0,20 | 0,19 | 0,51 | 0,51 | 0,62 | 0,54 | 0,43 | 0,97 |
| DSCG SAC 350 | 0,37 | 0,32 | 0,64 | 0,52 | 0,17 | 0,29 | 0,55 | 0,75 | 0,63 | 0,53 | 0,56 | 1,04 |
| D50 | 0,46 | 0,44 | 0,23 | 0,72 | 0,03 | 0,04 | 0,11 | 0,42 | 0,43 | 0,10 | 0,08 | 1,61 |
| DSCG SAC 50 | 0,59 | 0,56 | 0,20 | 0,65 | 0,02 | 0,02 | 0,03 | 0,39 | 0,35 | 0,12 | 0,10 | 1,84 |
| CD | 0,44 | 0,47 | 0,60 | 0,25 | 0,06 | 0,04 | 0,30 | 0,47 | 0,43 | 0,32 | 0,37 | 1,32 |
| IM | 0,03 | 0,03 | 0,01 | 1,27 | 0,67 | 0,17 | 0,36 | 0,26 | 0,50 | 0,09 | 0,05 | 6,10 |
| DO | 1,49 | 1,49 | 0,27 | 1,40 | 0,64 | 1,37 | 1,38 | 1,59 | 1,60 | 0,33 | 0,33 | 7,53 |
| IL | 0,21 | 0,23 | 0,02 | 0,54 | 0,15 | 0,09 | 0,55 | 0,53 | 0,55 | 0,02 | 0,02 | 4,92 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Óleo de Canola (CO); Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Ciclopentasiloxano e Dimeticonol (CD); Decano (and) Dodecano (DD); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Succinato de diheptilo (e) Caprilóil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350); Succinato de diheptilo (e) Caprilóil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50); Malato de Diisostearil (DM); Dimeticona 350 (D350); Dimeticona 50 (D50); Ethyl Oleate (EO); Óleo de Girassol (HO); Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC); Laurato de isoamila (IL); Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprilato de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC);

APÊNDICE C – Resultados dos ensaios do coeficiente de fricção e viscosidade

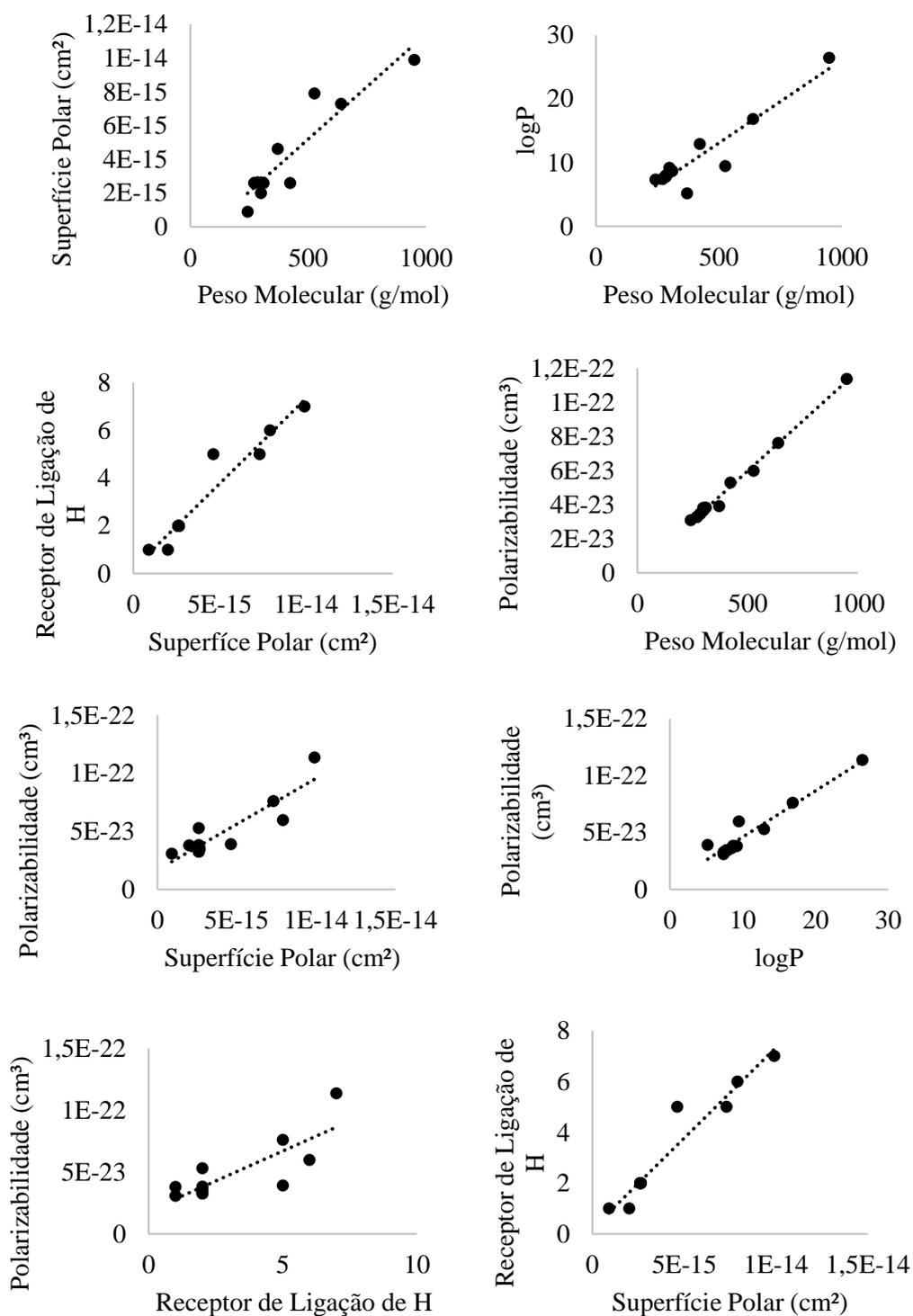
| Emoliente | Ensaio 1 | Ensaio 2 | Média | Desvio Padrão |
|-------------|----------|----------|-------|---------------|
| IP | 0,094 | 0,092 | 0,093 | 0,001 |
| DE | 0,120 | 0,122 | 0,121 | 0,001 |
| II | 0,125 | 0,130 | 0,128 | 0,004 |
| PC | 0,104 | 0,107 | 0,106 | 0,002 |
| CCT | 0,104 | 0,104 | 0,104 | 0,000 |
| O | 0,096 | 0,100 | 0,098 | 0,003 |
| CO | 0,085 | 0,085 | 0,085 | 0,000 |
| HO | 0,094 | 0,089 | 0,092 | 0,004 |
| DM | 0,117 | 0,119 | 0,118 | 0,001 |
| TC | 0,120 | 0,118 | 0,119 | 0,001 |
| C | 0,149 | 0,152 | 0,151 | 0,002 |
| EO | 0,107 | 0,110 | 0,109 | 0,002 |
| ICCAICC | 0,112 | 0,112 | 0,112 | 0,000 |
| ILPGD | 0,099 | 0,997 | 0,098 | 0,635 |
| DD | 0,125 | 0,125 | 0,125 | 0,000 |
| D350 | 0,188 | 0,163 | 0,175 | 0,018 |
| DSCGSAC 350 | 0,086 | 0,087 | 0,086 | 0,001 |
| D50 | 0,148 | 0,211 | 0,179 | 0,045 |
| DSCGSAC 50 | 0,102 | 0,097 | 0,100 | 0,004 |
| CD | 0,145 | 0,136 | 0,140 | 0,006 |
| IM | 0,098 | 0,097 | 0,097 | 0,001 |
| DO | 0,106 | 0,106 | 0,106 | 0,000 |
| IL | 0,109 | 0,106 | 0,107 | 0,002 |

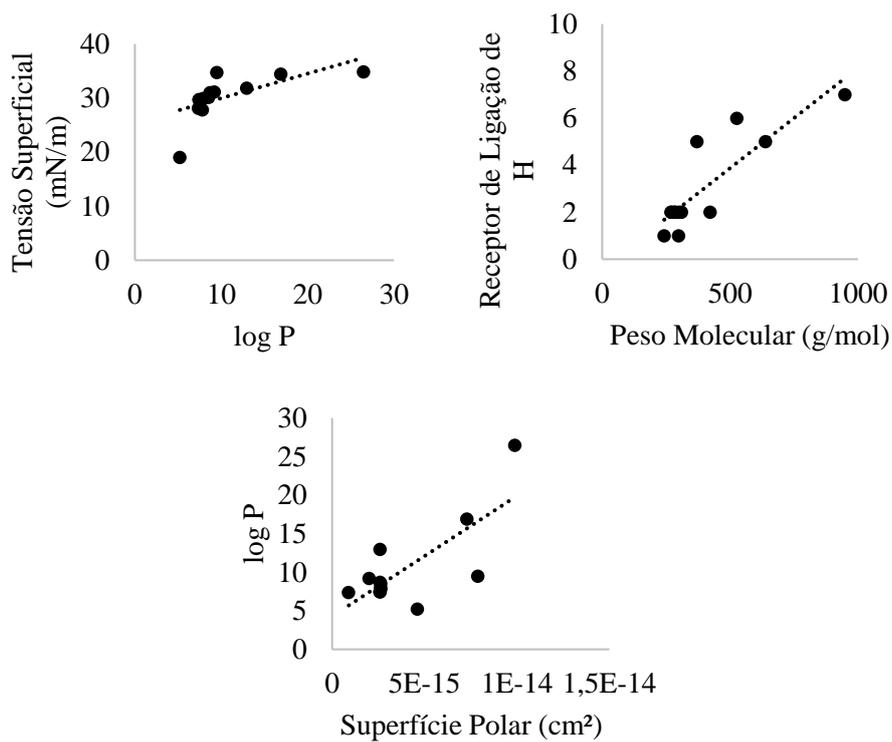
Fonte: da autora (2021). Legenda: Óleo de Canola (CO); Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Ciclopentasiloxano e Dimeticonol (CD); Decano (and) Dodecano (DD); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Succinato de diheptilo (e) Caprílico glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350); Succinato de diheptilo (e) Caprílico glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50); Malato de Diisostearil (DM); Dimeticona 350 (D350); Dimeticona 50 (D50); Ethyl Oleate (EO); Óleo de Girassol (HO); Isoamil Caprílico/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC); Laurato de isoamila (IL); Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprílico de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC);

| Emoliente | Viscosidade (cP) | | | |
|-------------|------------------|----------|---------|---------------|
| | Ensaio 1 | Ensaio 2 | Média | Desvio Padrão |
| IP | 7,67 | 7,67 | 7,67 | 0,00 |
| IM | 6,23 | 6,20 | 6,22 | 0,02 |
| DE | 4,95 | 4,96 | 4,95 | 0,00 |
| DO | 14,20 | 14,42 | 14,31 | 0,15 |
| II | 6,19 | 6,06 | 6,12 | 0,09 |
| PC | 6,06 | 6,03 | 6,05 | 0,02 |
| CCT | 24,75 | 25,11 | 24,93 | 0,26 |
| O | 45,28 | 45,41 | 45,35 | 0,09 |
| CO | 58,66 | 56,86 | 57,76 | 1,28 |
| HO | 61,16 | 59,73 | 60,44 | 1,01 |
| DM | 2298,63 | 2314,63 | 2306,63 | 11,31 |
| TC | 5329,17 | 5369,43 | 5349,30 | 28,47 |
| C | 5,48 | 5,22 | 5,35 | 0,19 |
| EO | 7,37 | 7,22 | 7,29 | 0,11 |
| ICCAICC | 4,26 | 4,22 | 4,24 | 0,03 |
| ILPGD | 7,18 | 7,43 | 7,30 | 0,18 |
| IL | 6,15 | 6,26 | 6,21 | 0,08 |
| DD | 3,09 | 3,12 | 3,11 | 0,02 |
| D350 | 320,48 | 315,84 | 318,16 | 3,28 |
| DSCGSAC 350 | 341,83 | 337,93 | 339,88 | 2,76 |
| D50 | 46,90 | 45,35 | 46,13 | 1,10 |
| DSCGSAC 50 | 45,33 | 45,44 | 45,39 | 0,07 |
| CD | 3418,10 | 3448,41 | 3433,26 | 21,43 |

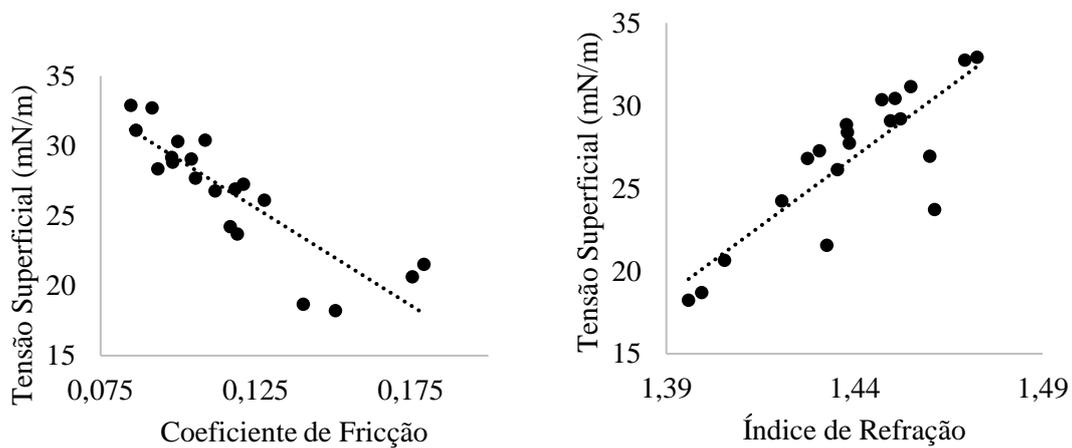
Fonte: da autora (2021). Legenda: Óleo de Canola (CO); Triglicerídeo Caprílico/Cáprico (CCT); Ciclopentasiloxano (C); Ciclopentasiloxano e Dimeticonol (CD); Decano (and) Dodecano (DD); Decil Oleato (DO); Éter Dicaprílico (DE); Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 350 (DSCGSAC 350); Succinato de diheptilo (e) Capriloil glicerina/Copolímero de Ácido Sebácico 50 (DSCGSAC 50); Malato de Diisostearil (DM); Dimeticona 350 (D350); Dimeticona 50 (D50); Ethyl Oleate (EO); Óleo de Girassol (HO); Isoamil Caprilato/Caprato (e) Água (e) Álcool isoamílico (e) Ácido caprílico (e) Ácido cáprico (ICCAICC); Laurato de isoamila (IL); Laurato de isoamil (e) Diheptanoato de propilenoglicol (ILPGD); Isonanoato de isononila (II); Miristato de isopropila (IM); Palmitato de isopropila (IP); Octildodecanol (O); Caprilato de propilheptilo (PC); Citrato de triisostearil (TC);

APÊNDICE D – Gráficos de correlação linear entre os parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo I





APÊNDICE E – Gráficos de correlação linear entre os parâmetros físico-químicos dos emolientes do grupo II



**APÊNDICE F - Parâmetros de desempenho e coeficientes de regressão dos
modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores
físico-químicos dos emolientes do grupo I**

| Parâmetros | | E | D | P | FA | TS |
|---------------------------|------------------------------------|-----------------------|------------------------|-----------------------|------------------------|------------------------|
| Coeficientes de regressão | 0 | 11,95 | 11,88 | -0,05 | 3,52 | 0,26 |
| | POL (cm ³) | -2,6010 ²³ | -2,69 10 ²³ | 1,71 10 ²³ | -1,66 10 ²³ | -1,95 10 ²² |
| | RLH | 0,72 | 0,76 | -0,55 | 0,50 | 0,12 |
| | γ_s (mN/m) | 0,21 | 0,22 | -0,18 | 0,24 | 0,02 |
| Status do Modelo | RMSE _c | 1,72 | 1,70 | 0,86 | 0,92 | 0,22 |
| | R ² _{cal} | 0,66 | 0,67 | 0,92 | 0,68 | 0,25 |
| | RMSE _{y-rand} | 2,22 | 2,02 | 2,22 | 1,29 | 0,20 |
| | R ² _{Yrand} | 0,37 | 0,46 | 0,36 | 0,31 | 0,34 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,45 | 0,38 | 0,71 | 0,51 | 0,00 |
| | RMSE _{cv} | 5,77 | 5,75 | 4,18 | 3,16 | 0,53 |
| Status da Predição | R ² _{cv} | 0,03 | 0,03 | 0,02 | 0,01 | 0,00 |
| | RMSE _p | 3,06 | 3,30 | 3,49 | 2,09 | 0,35 |
| | R ² _{pred} | 1,00 | 1,00 | 0,99 | 1,00 | 0,97 |
| | R ² _{m(test)} | 0,59 | 0,58 | 0,75 | 0,54 | 0,22 |

| Parâmetros | | BI | BR | OI | OR | FGI |
|---------------------------|------------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|
| Coeficientes de regressão | 0 | 9,82 | 7,49 | 9,86 | 4,83 | -0,43 |
| | POL (cm ³) | -1,64 10 ²² | -2,42 10 ²² | -2,26 10 ²³ | -3,36 10 ²³ | 5,30 10 ²² |
| | RLH | 0,05 | -0,03 | 0,56 | 1,26 | -0,15 |
| | γ_s (mN/m) | 0,02 | 0,11 | 0,25 | 0,48 | -0,04 |
| | RMSE _c | 0,09 | 0,21 | 1,52 | 1,03 | 0,35 |
| Status do Modelo | R ² _{cal} | 0,91 | 0,80 | 0,65 | 0,85 | 0,67 |
| | RMSE _{y-rand} | 0,24 | 0,36 | 2,13 | 2,07 | 0,48 |
| | R ² _{Yrand} | 0,26 | 0,36 | 0,28 | 0,31 | 0,35 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,77 | 0,59 | 0,49 | 0,67 | 0,46 |
| | RMSE _{cv} | 0,47 | 0,50 | 6,54 | 4,98 | 1,17 |
| | R ² _{cv} | 0,00 | 0,20 | 0,01 | 0,00 | 0,03 |
| | RMSE _p | 0,07 | 0,37 | 2,60 | 5,95 | 0,85 |
| Status da Predição | R ² _{pred} | 1,00 | 0,81 | 1,00 | 0,94 | 1,00 |
| | R ² _{m(test)} | 0,74 | 0,79 | 0,60 | 0,30 | 0,92 |

| Parâmetros | | FGR | PA |
|---------------------------|------------------------------------|-----------------------|------------------------|
| Coeficientes de regressão | 0 | -0,48 | 39,07 |
| | POL (cm ³) | 4,74 10 ²² | -8,13 10 ²³ |
| | RLH | -0,13 | 1,12 |
| | γ_s (mN/m) | -0,03 | 0,79 |
| | RMSE _c | 0,31 | 4,11 |
| Status do Modelo | R ² _{cal} | 0,67 | 0,82 |
| | RMSE _{y-rand} | 0,39 | 7,68 |
| | R ² _{Yrand} | 0,41 | 0,33 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,42 | 0,63 |
| | RMSE _{cv} | 1,14 | 16,00 |
| | R ² _{cv} | 0,03 | 0,08 |
| | RMSE _p | 0,93 | 13,66 |
| Status da Predição | R ² _{pred} | 1,00 | 0,90 |
| | R ² _{m(test)} | 0,89 | 0,52 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Polarizabilidade (POL), Receptores de Ligação de Hidrogênio (RLH), Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

**APÊNDICE G - Parâmetros de desempenho e coeficientes de regressão dos
modelos MLR para predição de atributos sensoriais a partir de descritores
físico-químicos dos emolientes do grupo II**

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | |
|------------------------------|------------------------------------|----------------------|------|-------|-------|-------|
| | | E | D | P | FA | TS |
| Coeficientes de regressão | 0 | 5,89 | 6,16 | -2,22 | 4,80 | -0,96 |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| | γ_s (mN/m) | 0,03 | 0,03 | 0,09 | 0,02 | 0,03 |
| | γ_t (mN/m) | 0,08 | 0,08 | -0,01 | -0,01 | 0,02 |
| Status do Modelo | RMSE _c | 2,01 | 2,02 | 0,78 | 0,51 | 0,20 |
| | R ² _{cal} | 0,46 | 0,45 | 0,90 | 0,86 | 0,36 |
| | RMSE _{y-rand} | 2,42 | 2,48 | 2,24 | 1,18 | 0,23 |
| | R ² _{Yrand} | 0,21 | 0,16 | 0,18 | 0,19 | 0,14 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,34 | 0,36 | 0,81 | 0,75 | 0,28 |
| | RMSE _{cv} | 4,26 | 4,18 | 1,62 | 3,75 | 0,24 |
| | R ² _{cv} | 0,04 | 0,04 | 0,58 | 0,90 | 0,14 |
| Status da Predição | RMSE _p | 0,67 | 0,84 | 3,21 | 2,64 | 0,20 |
| | R ² _{pred} | 1,00 | 1,00 | 0,88 | 0,02 | 0,91 |
| | R ² _{m(test)} | 0,94 | 0,94 | 0,86 | 0,00 | 0,87 |
| Parâmetros | | BI | BI | BR | OI | OR |
| Coeficientes de regressão | 0 | 10,28 | 8,14 | 2,54 | 4,48 | 4,33 |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| | γ_s (mN/m) | -0,01 | 0,04 | 0,14 | 0,11 | -0,12 |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | 0,02 | 0,09 | 0,04 | -0,03 |
| Status do Modelo | RMSE _c | 0,14 | 0,45 | 1,38 | 1,65 | 1,02 |
| | R ² _{cal} | 0,69 | 0,26 | 0,59 | 0,45 | 0,27 |
| | RMSE _{y-rand} | 0,24 | 0,44 | 1,86 | 1,95 | 1,10 |
| | R ² _{Yrand} | 0,14 | 0,28 | 0,26 | 0,21 | 0,16 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,62 | 0,00 | 0,45 | 0,33 | 0,18 |
| | RMSE _{cv} | 0,25 | 0,75 | 3,11 | 3,48 | 1,39 |
| | R ² _{cv} | 0,16 | 0,16 | 0,13 | 0,05 | 0,01 |
| Status da Predição | RMSE _p | 0,06 | 1,02 | 1,63 | 0,93 | 2,06 |
| | R ² _{pred} | 0,17 | 0,85 | 0,94 | 0,97 | 0,74 |
| | R ² _{m(test)} | 0,00 | 0,00 | 0,77 | 0,84 | 0,32 |

| Parâmetros | | FGR | FGR | PA |
|---------------------------|------------------------------------|-------|-------|-------|
| Coeficientes de regressão | 0 | 4,02 | 9,42 | 9,42 |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| | γ_s (mN/m) | -0,11 | 0,37 | 0,37 |
| | γ_t (mN/m) | -0,03 | 0,21 | 0,21 |
| Status do Modelo | RMSE _c | 0,91 | 8,93 | 8,93 |
| | R ² _{cal} | 0,27 | 0,32 | 0,32 |
| | RMSE _{y-rand} | 0,95 | 9,25 | 9,25 |
| | R ² _{Yrand} | 0,19 | 0,27 | 0,27 |
| | R ² _{p-y-rand} | 0,14 | 0,13 | 0,13 |
| | RMSE _{cv} | 1,30 | 97,25 | 97,25 |
| | R ² _{cv} | 0,00 | 0,22 | 0,22 |
| Status da Predição | RMSE _p | 1,94 | 8,48 | 8,48 |
| | R ² _{pred} | 0,96 | 0,86 | 0,86 |
| | R ² _{m(test)} | 0,90 | 0,36 | 0,36 |

Fonte: da autora (2021). Legenda: Polarizabilidade (POL), Receptores de Ligação de Hidrogênio (RLH), Espalhabilidade (E); Deslizamento (D); Pegajosidade (P); Filme Aveludado (FA); Toque Seco (TS); Brilho na Pele Imediato (BI); Brilho na Pele Residual (BR); Oleosidade Imediata (OI); Oleosidade Residual (OR); Filme Gorduroso Imediato (FGI); Filme Gorduroso Residual (FGR); Ponto de Absorção (PA).

**APÊNDICE H - Porcentagem de acertos e coeficientes de regressão dos modelos
LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-
químicos dos emolientes do grupo I**

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | | |
|---------------------------|------------------------------|-----------------------|------------------------|--------|-----------------------|------------------------|--------|
| | | Espalhabilidade | | | Deslizamento | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| | 0 | -0.21 | 1.21 | - | -0.20 | 1.20 | - |
| | POL (cm ³) | 2.63 10 ²² | -2.63 10 ²² | - | 2.72 10 ²² | -2.72 10 ²² | - |
| | RLH | -0,07 | 0,07 | - | -0,07 | 0,07 | - |
| | γ_s (mN/m) | -0.02 | 0.02 | - | -0.02 | 0.02 | - |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 3 |
| | n | 10 | 1 | 9 | 10 | 1 | 9 |
| | Acertos Calibração | 10,00 | 1,00 | 9,00 | 10,00 | 1,00 | 9,00 |
| | Acertos de randomização de y | 9,50 | 1,00 | 8,50 | 9,10 | 1,00 | 8,10 |
| | Acertos Validação Cruzada | 6,00 | 0,00 | 6,00 | 6,00 | 0,00 | 6,00 |
| | Calibração (%) | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 95,00 | 100,00 | 94,44 | 91,00 | 100,00 | 90,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 60,00 | 0,00 | 66,67 | 60,00 | 0,00 | 66,67 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 3 |
| | n | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 |
| | Acertos teste | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 |
| | Teste (%) | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | | |
|---------------------------|------------------------------|------------------------|-----------------------|--------|-----------------------|------------------------|--------|
| | | Pegajosidade | | | Filme Aveludado | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| | 0 | 1,01 | -0,01 | - | -0,20 | 1,20 | - |
| | POL (cm ³) | -1,72 10 ²² | 1,72 10 ²² | - | 2,72 10 ²² | -2,72 10 ²² | - |
| | RLH | 0,06 | -0,06 | - | -0,08 | 0,08 | - |
| | γ_s (mN/m) | 0,02 | -0,02 | - | -0,02 | 0,02 | - |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 2 |
| | n | 10 | 9 | 1 | 10 | 1 | 9 |
| | Acertos Calibração | 10,00 | 9,00 | 1,00 | 10,00 | 1,00 | 9,00 |
| | Acertos de randomização de y | 9,40 | 8,40 | 1,00 | 9,10 | 1,00 | 8,10 |
| | Acertos Validação Cruzada | 8,00 | 8,00 | 0,00 | 6,00 | 0,00 | 6,00 |
| | Calibração (%) | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 94,00 | 93,33 | 100,00 | 91,00 | 100,00 | 90,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 80,00 | 88,89 | 0,00 | 60,00 | 0,00 | 66,67 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 2 |
| | n | 3 | 2 | 1 | 3 | 1 | 2 |
| | Acertos teste | 2 | 2 | 0 | 3 | 1 | 2 |
| | Teste (%) | 66,67 | 100 | 0 | 100 | 100 | 100 |

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | | |
|---------------------------|------------------------------|-----------------------|------------------------|--------|-----------------------|------------------------|--------|
| | | Oleosidade Imediata | | | Oleosidade Residual | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| | 0 | -0,23 | 1,23 | - | -0,26 | 1,26 | - |
| | POL (cm ³) | 2,61 10 ²² | -2,61 10 ²² | - | 2,59 10 ²² | -2,59 10 ²² | - |
| | RLH | -0,08 | 0,08 | - | -0,07 | 0,07 | - |
| | γ_s (mN/m) | -0,02 | 0,02 | - | -0,02 | 0,02 | - |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 2 |
| | n | 10 | 1 | 9 | 10 | 1 | 9 |
| | Acertos Calibração | 10,00 | 1,00 | 9,00 | 10,00 | 1,00 | 9,00 |
| | Acertos de randomização de y | 9,40 | 1,00 | 8,40 | 9,00 | 1,00 | 8,00 |
| | Acertos Validação Cruzada | 6,00 | 0,00 | 6,00 | 6,00 | 0,00 | 6,00 |
| | Calibração (%) | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 94,00 | 100,00 | 93,33 | 90,00 | 100,00 | 88,89 |
| | Validação Cruzada (%) | 60,00 | 0,00 | 66,67 | 60,00 | 0,00 | 66,67 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 3 |
| | n | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 |
| | Acertos teste | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 |
| | Teste (%) | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | | |
|---------------------------|--|---------------------------|-----------------------|---------------------------|---------------------------|-----------------------|-----|
| | | Filme Gorduroso Imediato | | | Filme Gorduroso Residual | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| | 0 | 1,21 | -0,21 | 1,21 | 1,26 | -0,26 | - |
| | POL (cm ³) | -2,63 10 ²² | 2,63 10 ²² | -2,63 10 ²² | -2,59 10 ²² | 2,59 10 ²² | - |
| | RLH | 0,07 | -0,07 | 0,07 | 0,07 | -0,07 | - |
| | γ_s (mN/m) | 0,02 | -0,02 | 0,02 | 0,02 | -0,02 | - |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 2 | Global | 1 | 2 |
| | n | 10 | 9 | 1 | 10 | 9 | 1 |
| | Acertos Calibração o Acertos de randomiza ção de y | 10 | 9 | 1 | 10 | 9 | 1 |
| | Acertos Validação Cruzada | 9,10 | 8,10 | 1 | 9 | 8 | 1 |
| | Calibração (%) | 6 | 6 | 0 | 6 | 6 | 0 |
| | Randomiza ção de y (%) | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |
| | Validação Cruzada (%) | 91 | 90,00 | 100 | 92 | 91,11 | 100 |
| | | 60 | 66,67 | 0 | 60 | 66,67 | 0 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 2 | Global | 1 | 2 |
| | n | 3 | 2 | 1 | 3 | 2 | 1 |
| | Acertos teste | 3 | 2 | 1 | 3 | 2 | 1 |
| | Teste (%) | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|------------------------|-----------------------|-----------------------|-------|
| | | Toque Seco | | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | -1,09 | 2,30 | -0,20 | |
| | POL (cm ³) | -3,94 10 ²² | 1,51 10 ²² | 2,42 10 ²² | |
| | RLH | 0,23 | -0,10 | -0,13 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,08 | -0,08 | -0,01 | |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 10 | 4 | 3 | 3 |
| | Acertos Calibração | 5,00 | 3,00 | 1,00 | 1,00 |
| | Acertos de randomização de y | 6,40 | 2,60 | 1,60 | 2,20 |
| | Acertos Validação Cruzada | 2,00 | 2,00 | 0,00 | 0,00 |
| | Calibração (%) | 50,00 | 75,00 | 33,33 | 33,33 |
| | Randomização de y (%) | 64,00 | 65,00 | 53,33 | 73,33 |
| | Validação Cruzada (%) | 20,00 | 50,00 | 0,00 | 0,00 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 3 | 1 | 1 | 1 |
| | Acertos teste | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | Teste (%) | 0 | 0 | 0 | 0 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|------------------------|-----------------------|--------|---|
| | | Ponto de Absorção | | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | 1,21 | -0,21 | - | |
| | POL (cm ³) | -2,61 10 ²² | 2,61 10 ²² | - | |
| | RLH | 0,08 | -0,08 | - | |
| | γ_s (mN/m) | 0,02 | -0,02 | - | |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 3 | |
| | n | 10 | 9 | 1 | |
| | Acertos Calibração | 10,00 | 9,00 | 1,00 | |
| | Acertos de randomização de y | 9,10 | 8,10 | 1,00 | |
| | Acertos Validação Cruzada | 6,00 | 6,00 | 0,00 | |
| | Calibração (%) | 100,00 | 100,00 | 100,00 | |
| | Randomização de y (%) | 91,00 | 90,00 | 100,00 | |
| | Validação Cruzada (%) | 60,00 | 66,67 | 0,00 | |
| Status da Predição | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 3 | 1 | 1 | 1 |
| | Acertos teste | 1 | 1 | 0 | 0 |
| | Teste (%) | 33,33 | 100 | 0 | 0 |

Fonte: da autora (2021).

**APÊNDICE I - Porcentagem de acertos e coeficientes de regressão dos modelos
LDA para predição de atributos sensoriais a partir de descritores físico-
químicos dos emolientes do grupo II**

| Parâmetros | | Atributos Sensoriais | | | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|--------|-----------------|--------|--------|
| | | Pegajosidade | | | Filme aveludado | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| Coeficientes de regressão | 0 | 1,51 | -0,51 | 1,00 | -0,29 | 1,29 | - |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | - |
| | γ_s (mN/m) | -0,02 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | - |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | 0,00 | | 0,01 | -0,01 | - |
| | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 2 |
| Status do Modelo | n | 16,00 | 15,00 | 1,00 | 16,00 | 2,00 | 14,00 |
| | Acertos Calibração | 16,00 | 15,00 | 1,00 | 15,00 | 1,00 | 14,00 |
| | Acertos de randomização de y | 15,00 | 14,00 | 1,00 | 14,30 | 2,00 | 12,30 |
| | Acertos Validação Cruzada | 14,00 | 14,00 | 0,00 | 14,00 | 0,00 | 14,00 |
| | Calibração (%) | 100,00 | 100,00 | 100,00 | 93,75 | 50,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 93,75 | 93,33 | 100,00 | 89,38 | 100,00 | 87,86 |
| | Validação Cruzada (%) | 87,50 | 93,33 | 0,00 | 87,50 | 0,00 | 100,00 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 3 | Global | 1 | 2 |
| | n | 4,00 | 3,00 | 1,00 | 4,00 | 1,00 | 3,00 |
| | Acertos teste | 3,00 | 3,00 | 0,00 | 2,00 | 0,00 | 2,00 |
| | Teste (%) | 75,00 | 100,00 | 0,00 | 50,00 | 0,00 | 66,67 |

| Coeficientes de regressão | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|-------|--------|
| | | Espalhabilidade | | | |
| | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | -0,51 | 0,17 | 1,34 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,02 | 0,00 | -0,02 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | -0,01 | 0,01 | |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 16,00 | 1,00 | 1,00 | 14,00 |
| | Acertos Calibração | 15,00 | 1,00 | 0,00 | 14,00 |
| | Acertos de randomização de y | 14,20 | 1,00 | 0,80 | 12,40 |
| | Acertos Validação Cruzada | 13,00 | 0,00 | 0,00 | 13,00 |
| | Calibração (%) | 93,75 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 88,75 | 100,00 | 80,00 | 88,57 |
| | Validação Cruzada (%) | 81,25 | 0,00 | 0,00 | 92,86 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 3 | |
| | n | 4,00 | 1 | 1 | |
| | Acertos teste | 2,00 | 0 | 0 | |
| | Teste (%) | 50,00 | 0 | 0 | |

| Coficientes de regressão | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | |
|------------------------------|------------|----------------------|-------|--------|
| | | Deslizamento | | |
| | Categoria | 1 | 2 | 3 |
| 0 | -0,51 | 0,17 | 1,34 | |
| μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| γ_s (mN/m) | 0,02 | 0,00 | -0,02 | |
| γ_t (mN/m) | 0,00 | -0,01 | 0,01 | |
| | Global | 1 | 2 | 3 |
| n | 16,00 | 1,00 | 1,00 | 14,00 |
| Acertos Calibração | 15,00 | 1,00 | 0,00 | 14,00 |
| Acertos de randomização de y | 14,20 | 1,00 | 0,70 | 12,50 |
| Acertos Validação Cruzada | 13,00 | 0,00 | 0,00 | 13,00 |
| Calibração (%) | 93,75 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| Randomização de y (%) | 88,75 | 100,00 | 70,00 | 89,29 |
| Validação Cruzada (%) | 81,25 | 0,00 | 0,00 | 92,86 |
| | Global | 1 | 3 | |
| n | 4 | 1 | 1 | |
| Acertos teste | 2 | 0 | 0 | |
| Teste (%) | 50 | 0 | 0 | |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|-------|--------|
| | | Toque Seco | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | | | | |
| | 0 | -1,20 | -1,34 | 3,54 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,03 | 0,05 | -0,08 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,02 | 0,01 | -0,03 | |
| | Global | 1 | 2 | 3 | |
| | n | 16,00 | 5,00 | 3,00 | 8,00 |
| Status do Modelo | Acertos Calibração | 9,00 | 3,00 | 0,00 | 6,00 |
| | Acertos de randomização de y | 10,70 | 3,50 | 1,40 | 5,80 |
| | Acertos Validação Cruzada | 7,00 | 2,00 | 0,00 | 5,00 |
| | Calibração (%) | 56,25 | 60,00 | 0,00 | 75,00 |
| | Randomização de y (%) | 66,88 | 70,00 | 46,67 | 72,50 |
| | Validação Cruzada (%) | 43,75 | 40,00 | 0,00 | 62,50 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 4,00 | 1,00 | 1,00 | 2,00 |
| | Acertos teste | 3,00 | 1,00 | 0,00 | 2,00 |
| | Teste (%) | 75,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|-------|--------|
| | | Oleosidade Imediata | | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | -0,45 | 0,70 | 0,76 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,01 | -0,02 | 0,01 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| Status do Modelo | n | 16,00 | 1,00 | 1,00 | 14,00 |
| | Acertos Calibração | 15,00 | 1,00 | 0,00 | 14,00 |
| | Acertos de randomização de y | 14,30 | 1,00 | 0,70 | 12,60 |
| | Acertos Validação Cruzada | 14,00 | 0,00 | 0,00 | 14,00 |
| | Calibração (%) | 93,75 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 89,38 | 100,00 | 70,00 | 90,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 87,50 | 0,00 | 0,00 | 100,00 |
| Status da Predição | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 4,00 | 1,00 | 1,00 | 2,00 |
| | Acertos teste | 2,00 | 0,00 | 0,00 | 2,00 |
| | Teste (%) | 50,00 | 0,00 | 0,00 | 100,00 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|-------|--------|
| | | Oleosidade Residual | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | -0,22 | 0,37 | 0,85 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,01 | -0,01 | 0,00 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | -0,01 | 0,01 | |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 16,00 | 1,00 | 2,00 | 13,00 |
| Status do Modelo | Acertos Calibração | 14,00 | 0,00 | 1,00 | 13,00 |
| | Acertos de randomização de y | 13,30 | 0,90 | 1,70 | 10,70 |
| | Acertos Validação Cruzada | 13,00 | 0,00 | 0,00 | 13,00 |
| | Calibração (%) | 87,50 | 0,00 | 50,00 | 100,00 |
| | Randomização de y (%) | 83,13 | 90,00 | 85,00 | 82,31 |
| | Validação Cruzada (%) | 81,25 | 0,00 | 0,00 | 100,00 |
| | | | Global | 1 | 2 |
| Status da Predição | n | 4,00 | 1,00 | 1,00 | 2,00 |
| | Acertos teste | 2,00 | 0,00 | 0,00 | 2,00 |
| | Teste (%) | 50,00 | 0,00 | 0,00 | 100,00 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|--------------------------|--------|-------|-------|
| | | Filme Gorduroso Imediato | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | | | | |
| | 0 | 0,37 | -0,30 | 0,94 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,01 | 0,01 | -0,03 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,01 | 0,00 | 0,00 | |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 16,00 | 13,00 | 2,00 | 1,00 |
| Status do Modelo | Acertos Calibração | 13,00 | 12,00 | 1,00 | 0,00 |
| | Acertos de randomização de y | 13,20 | 10,60 | 1,70 | 0,90 |
| | Acertos Validação Cruzada | 13,00 | 12,00 | 1,00 | 0,00 |
| | Calibração (%) | 81,25 | 92,31 | 50,00 | 0,00 |
| | Randomização de y (%) | 82,50 | 81,54 | 85,00 | 90,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 81,25 | 92,31 | 50,00 | 0,00 |
| | | | Global | 1 | 2 |
| Status da Predição | n | 4,00 | 2,00 | 1,00 | 1,00 |
| | Acertos teste | 2,00 | 2,00 | 0,00 | 0,00 |
| | Teste (%) | 50,00 | 100,00 | 0,00 | 0,00 |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|------------------------------|------------------------------------|--------------------------|--------|--------|-------|
| | | Filme Gorduroso Residual | | | |
| | | Categoria | 1 | 2 | 3 |
| Coeficientes de regressão | 0 | 1 | 2 | 3 | |
| | μ (cP) | -0,10 | 0,15 | 0,95 | |
| | γ_s (mN/m) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,03 | -0,01 | -0,03 | |
| Status do Modelo | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 16,00 | 13,00 | 2,00 | 1,00 |
| | Acertos Calibração | 15,00 | 13,00 | 2,00 | 0,00 |
| | Acertos de randomização de y | 13,50 | 10,90 | 1,80 | 0,80 |
| | Acertos Validação Cruzada | 15,00 | 13,00 | 2,00 | 0,00 |
| | Calibração (%) | 93,75 | 100,00 | 100,00 | 0,00 |
| | Randomização de y (%) | 84,38 | 83,85 | 90,00 | 80,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 93,75 | 100,00 | 100,00 | 0,00 |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 4 | 2 | 1 | 1 |
| Acertos teste | 3,00 | 2,00 | 1,00 | 0,00 | |
| Teste (%) | 75,00 | 100,00 | 100,00 | 0,00 | |

| | Parâmetros | Atributos Sensoriais | | | |
|---------------------------|------------------------------|----------------------|--------|-------|--------|
| | | Ponto de Absorção | | | |
| Coeficientes de regressão | Categoria | 1 | 2 | 3 | |
| | 0 | 1,24 | -0,97 | 0,73 | |
| | μ (cP) | 0,00 | 0,00 | 0,00 | |
| | γ_s (mN/m) | -0,03 | 0,04 | -0,01 | |
| | γ_t (mN/m) | 0,00 | 0,01 | -0,01 | |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| | n | 16,00 | 9,00 | 4,00 | 3,00 |
| Status do Modelo | Acertos Calibração | 12,00 | 9,00 | 2,00 | 1,00 |
| | Acertos de randomização de y | 10,10 | 5,60 | 2,10 | 2,40 |
| | Acertos Validação Cruzada | 6,00 | 6,00 | 0,00 | 0,00 |
| | Calibração (%) | 75,00 | 100,00 | 50,00 | 33,33 |
| | Randomização de y (%) | 63,13 | 62,22 | 52,50 | 80,00 |
| | Validação Cruzada (%) | 37,50 | 66,67 | 0,00 | 0,00 |
| | | Global | 1 | 2 | 3 |
| Status da Predição | n | 4,00 | 2,00 | 1,00 | 1,00 |
| | Acertos teste | 3,00 | 2,00 | 0,00 | 1,00 |
| | Teste (%) | 75,00 | 100,00 | 0,00 | 100,00 |

Fonte: da autora (2021).