

# A review of the study of environmental modeling tools to understand the real impact of cosmetic products on environmental safety

## Revisão do estudo de ferramentas de modelagem ambiental para entender o real impacto dos produtos cosméticos na segurança ambiental

Caroline Inácio Bianchi and Patrícia Maria Berardo Gonçalves Maia Campos  

**Keywords:** environmental modeling tools, environmental risk assessment, cosmetic products, environmental impact, formulation

**Palavras-chave:** ferramentas de modelagem ambiental, avaliação de risco ambiental, produtos cosméticos, impacto ambiental, formulação

### To Cite:

Bianchi, C. I. & Maia Campos, P. M. B. G. (2023) A review of the study of environmental modeling tools to understand the real impact of cosmetic products on environmental safety. *Biomedical and Biopharmaceutical Research*, 20(1), 1-10.

 [10.19277/bbr.20.1.312](https://doi.org/10.19277/bbr.20.1.312)

Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto – Universidade de São Paulo, Avenida do Café, S/N, Ribeirão Preto - SP, 14040-9031

Correspondence to / Correspondência a:  
[pmcampos@usp.br](mailto:pmcampos@usp.br)

Received / Recebido: 18/04/2023  
Accepted / Aceite: 12/07/2023

### Abstract

In contrast to human health risk assessment, there are no definitive guidelines for environmental risk assessment of cosmetic products. The objective of this study was to perform an in-depth analysis of ten modeling environmental tools and to establish the best rationale to assess the impact on environmental safety considering the recent global pandemic scenario and the evolution of the consumer mindset. A literature analysis was performed for the ten modeling environmental tools, and when possible, each was downloaded for comparison. Chesar was the tool that proved to be the easiest to enter data, and it has the more straightforward and direct application steps; thus, it was chosen for the initial assessment of ingredients that demonstrate potential environmental hazards. For high-level tools, it was not possible to establish a comparison for choice, as the models are private and have little data in the literature. Even so, for a more detailed assessment after the first initial assessment via Chesar, iSTREEM could be used. This study delivers important knowledge about the modeling tools and how to establish a rationale for environmental risk assessment.

### Resumo

Em contraste com a avaliação de risco à saúde humana, não há diretrizes definitivas para avaliação de risco ambiental de produtos cosméticos. O objetivo deste estudo foi realizar uma análise aprofundada de dez ferramentas de modelagem ambiental e estabelecer o melhor racional para avaliar o impacto na segurança ambiental considerando o recente cenário global de pandemia e evolução da mentalidade do consumidor. Foi realizada uma análise da literatura para as dez ferramentas ambientais de modelagem, sendo possível o download e comparação entre cada uma delas. O Chesar foi a ferramenta que se mostrou mais fácil para inserir dados e tem as etapas de aplicação mais claras e diretas e foi escolhida para a avaliação inicial de ingredientes que demonstram potenciais riscos ambientais. Para ferramentas de alto nível, não foi possível estabelecer comparação para escolha, pois os modelos são particulares e possuem poucos dados na literatura. Mesmo assim, para uma avaliação mais detalhada após a primeira avaliação inicial via Chesar, o iSTREEM pode ser usado. Este estudo fornece conhecimentos importantes sobre as ferramentas de modelagem e como estabelecer um racional para a avaliação de risco ambiental.

## Introduction

From the twentieth century, the period in which cosmetic products gained market share, to the current context, a natural evolution in consumer mentality could be observed. Over the years, the concern becomes not only with the cosmetic efficacy of the product, but also with the human and environmental safety of the products purchased, and the cosmetic industries need to be aware of these and other new needs (1).

To understand the evolution of the mindset over the years, as well as the current mentality, it is necessary to understand the context in which the consumer is inserted because, although consumption is habitual, it is also contextual and governed by the characteristics of the period.

There are four main contexts that interfere in the change of consumption habits: (1) change in the social context; (2) technological; (3) rules and regulations and, (4) natural disasters such as earthquakes, hurricanes, and global pandemics such as the Covid-19 pandemic we have experienced. All these contexts can significantly interfere with both consumption and production and the supply chain (2), and, specifically discussing the pandemic caused by the Coronavirus SARS-CoV-2, impacts and changes in consumption habits have been observed since March 2020.

According to the World Health Organization, one of the actions that helps prevent the disease is frequent and thorough hand hygiene, with soap and water or the use of hand sanitizers (3). The contagious nature of the new virus has raised awareness about the importance of personal hygiene, which may explain, for example, the 80% increase in spending on personal hygiene products in the same period in Australia (4) and understanding how hand washing behavior can suggest health knowledge (5), helping to prevent contagious diseases. Corroborating this fact, a recent Euromonitor survey (2021) indicates a growth in the frequency of liquid soap use across different continents and points out how the consumer today is "obsessed" with safety (6).

In addition to the high demand for personal hygiene products such as soaps, the opportunity for other hand products has emerged, especially those that offer repairing or healing benefits (7), as excessive

## Introdução

A partir do século XX, período em que os produtos cosméticos ganharam mercado, até ao contexto atual, pôde-se observar uma evolução natural na mentalidade do consumidor. Com o passar dos anos, a preocupação passa a ser não só com a eficácia cosmética do produto, mas também com a segurança humana e ambiental dos produtos adquiridos e as indústrias cosméticas precisam estar atentas a essas e outras novas necessidades (1).

Para entender a evolução da mentalidade ao longo dos anos, assim como a mentalidade atual, é necessário entender o contexto em que o consumidor está inserido, pois, embora o consumo seja habitual, ele também é contextual e regido pelas características de cada época.

Existem quatro contextos principais que interferem na mudança dos hábitos de consumo: (1) mudança no contexto social; (2) tecnológico; (3) regras e regulamentos e (4) desastres naturais como terremotos, furacões e pandemias globais como a pandemia de Covid-19 que vivemos. Todos esses contextos podem interferir significativamente tanto no consumo quanto na produção e na cadeia de suprimentos (2) e, especificamente discutindo a pandemia, provocada pelo Coronavírus SARS-CoV-2, impactos e mudanças nos hábitos de consumo são observados desde março de 2020.

Uma das ações que auxiliam na prevenção da doença é a higienização frequente e completa das mãos, com água e sabão ou uso de desinfetantes para as mãos, segundo a Organização Mundial da Saúde (3). A natureza contagiosa do novo vírus aumentou a conscientização sobre a importância da higiene pessoal, o que pode explicar, por exemplo, o aumento de 80% nos gastos com produtos de higiene pessoal no mesmo período na Austrália (4) e entender como a lavagem das mãos o comportamento pode sugerir conhecimentos de saúde (5), auxiliando na prevenção de doenças contagiosas. Corroborando com esse fato, uma pesquisa recente da Euromonitor (2021) indica um crescimento na frequência de uso de sabonetes líquidos em diferentes continentes e aponta como o consumidor hoje está "obcecado" por segurança (6).

Além da alta demanda por produtos de higiene pessoal, como sabonetes, surgiu a oportunidade de outros produtos para as mãos, principalmente aqueles que oferecem benefícios reparadores ou cicatrizantes (7), pois o uso excessivo de produtos de higiene e

use of hygiene and cleaning products can damage the skin barrier function, increasing transepidermal water loss (TEWL), favoring the appearance of skin irritations (8).

Thus, the emphasis on hand care during the pandemic period led to an increase in the use of liquid soaps and hand moisturizers and, consequently, an increase in consumer and environmental exposure to the ingredients of these formulations, which can directly impact human and environmental safety. Given this scenario, it is of great importance to conduct studies aimed at meeting the new needs of consumers, as well as ensuring human and environmental safety in the face of new exposure.

The theoretical evaluation of ingredients for human and environmental safety and the choice of ingredients for cosmetic formulations begins with the study of the toxicological profile (hazard), analyzing all possible toxicological results for each ingredient used in the formulation. The mode of use of the product, the exposure, and the target audience are then considered. After that, risk assessment is required (9), starting from hazard identification, dose-response assessment, exposure assessment, and risk characterization calculating the margin of safety and quantitative comparisons. Robust guidelines exist for human safety risk assessment, (9,10). However, there are no well-defined guidelines for environmental risk assessment.

Due to differences in socioeconomic and environmental factors, including product use, wastewater treatment infrastructure, and dilution in receiving waters, large spatial variations in exposure to these "down-the-drain" wastewater chemicals are expected between countries and regions, and even within the same basin (11). Therefore, it is extremely challenging to map and perform an environmental risk assessment for all scenarios.

Alternatively, to understand the potential environmental hazards of cosmetic product ingredients, modeling approaches can be used to provide predicted environmental concentrations (PECs) of ingredients and provide a means to perform an environmental risk assessment by comparing PECs with toxicity thresholds for Predicted No-Effect Concentrations (PNECs)

limpeza pode danificar a pele função de barreira, aumentando a perda de água transepidermica (TEWL), favorecendo o aparecimento de irritações cutâneas (8).

Assim, a ênfase nos cuidados com as mãos durante o período de pandemia proporcionou aumento do uso de sabonetes líquidos e hidratantes para as mãos e, conseqüentemente, aumento da exposição do consumidor e do meio ambiente aos ingredientes dessas formulações, o que pode impactar diretamente na segurança humana e ambiental. Diante desse cenário, é de grande importância a realização de estudos que visem atender às novas necessidades dos consumidores, bem como garantir a segurança humana e ambiental diante da nova exposição.

A avaliação teórica dos ingredientes quanto à segurança humana e ambiental e escolha dos ingredientes para formulações cosméticas inicia-se com o estudo do perfil toxicológico (risco), analisando todos os resultados toxicológicos possíveis para cada ingrediente utilizado na formulação. A seguir, considera-se o modo de uso do produto, a exposição e o público-alvo. Depois disso, a avaliação de risco é necessária (9), a partir da identificação de perigo, avaliação dose-resposta, avaliação de exposição e caracterização de risco, calculando a margem de segurança e comparações quantitativas. Para a avaliação do risco de segurança humana, existem diretrizes robustas (9,10). No entanto, para avaliação de risco ambiental não há diretrizes bem definidas.

Devido às diferenças nos fatores socioeconômicos e ambientais, incluindo uso do produto, infraestrutura de tratamento de esgoto e diluição nas águas receptoras, grandes variações espaciais na exposição a esses produtos químicos de esgoto são esperadas entre países e regiões, e até mesmo dentro da mesma bacia (11). Portanto, é extremamente desafiador mapear e realizar uma avaliação de risco ambiental para todos os cenários.

Alternativamente, para entender os perigos ambientais potenciais dos ingredientes de produtos cosméticos, abordagens de modelagem podem ser usadas para fornecer concentrações ambientais previstas (CAPs) de ingredientes e fornecer um meio para realizar uma avaliação de risco ambiental comparando CAPs com limites de toxicidade para os quais as concentrações de efeitos não previstos (CENP).

In the cosmetic scenario, formulations are known to be continuously introduced into aquatic systems and, unlike pharmaceutical products, for example, cosmetic products present ecological risks of greater perseverance due to their continuous use throughout life and that they are not metabolized prior to exposure.

According to the last Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC) workshop in 2016, there are ten environmental modeling tools that can perform an environmental risk assessment: E-FAST (USA), EUSES (EU), Chesar (EU), CRAM (Canada), HydroROUT CFM (St. Lawrence R.), GREAT-ER (Europe), STREAM-EU (Europe), ScenAT (World), PhATE™ (USA), iSTREEM® (USA + Ontario).

In this context, the aim of this study was to perform an in-depth analysis of these ten environmental modeling tools and establish the best rationale for assessing the impact on environmental safety considering the recent global scenario and contributing to the development of safer cosmetics for humans and the environment.

The ten methodologies were studied through the literature, using articles, tool manuals and environmental safety assessment guides, such that each type of model could be understood. After that, some modeling tools could be downloaded to compare and analyze against the ECHA (European Chemical Agency) Guidance.

Finally, it was possible to choose one screening model for initial risk assessment and a high-level model for in-depth risk assessment.

This study had an innovative proposal, as it presented the study and comparison of ten environmental modeling tools that can assist in the environmental risk assessment required by the European Directive and the new mindset of cosmetic product consumers.

In this context, this study brings an important contribution by proposing a complete rationale for environmental risk assessment, considering the study of computational models and contributing to the development of safer cosmetics for humans and the environment.

No cenário cosmético, sabe-se que as formulações são continuamente introduzidas nos sistemas aquáticos e, diferentemente dos produtos farmacêuticos, por exemplo, os produtos cosméticos apresentam riscos ecológicos de maior perseverança devido ao seu uso contínuo ao longo da vida e não metabolizados antes da exposição.

De acordo com o último workshop do SETAC (*Society of Environmental Toxicology and Chemistry*) em 2016, existem dez ferramentas de modelagem ambiental que podem realizar uma avaliação de risco ambiental: E-FAST (EUA), EUSES (UE), Chesar (UE), CRAM (Canadá), HydroROUT CFM (St. Lawrence R.), GREAT-ER (Europa), STREAM-EU (Europa), ScenAT (Mundo), PhATE™ (EUA), iSTREEM® (EUA + Ontário).

Neste contexto, o objetivo deste estudo foi realizar uma análise aprofundada de dez ferramentas de modelagem ambiental e estabelecer a melhor justificativa para avaliar o impacto na segurança ambiental considerando o recente cenário global e contribuindo para o desenvolvimento de cosméticos mais seguros para o ser humano seres e para o meio ambiente.

As dez metodologias foram estudadas por meio da literatura - artigos, manuais das ferramentas e guias de avaliação de segurança ambiental, e foi compreendido cada tipo de modelo. Depois disso, algumas ferramentas de modelagem puderam ser baixadas para comparar e analisar frente à diretriz da ECHA (Agência Europeia dos Produtos Químicos / *European Chemical Agency*).

No final foi possível escolher um modelo de triagem para avaliação de risco inicial e um modelo de alto nível para avaliação de risco profunda.

Este estudo teve uma proposta inovadora, pois apresentou o estudo e comparação de dez ferramentas de modelagem ambiental que podem auxiliar na avaliação do risco ambiental exigido pela Diretiva Europeia e pela nova mentalidade dos consumidores de produtos cosméticos.

Nesse contexto, este estudo traz uma importante contribuição ao propor um racional completo para avaliação de risco ambiental, considerando o estudo de modelos computacionais e contribuindo para o desenvolvimento de cosméticos mais seguros para o ser humano e para o meio ambiente.

## Materials and methods

Based on the literature review, modeling tools were studied and divided into two groups:

- Screening models: conservative assessment that standardizes the data.
- High-level models: detailed assessment that requires more information about the location to be evaluated.

With the studies of ECHA literature, it was possible to understand the four steps needed to make the environmental risk assessment: Input, Estimation of substance release, Environmental distribution and Risk characterization, in addition to other parameters, as indicated in Figure 1.

Whether the tools follow the steps of ECHA on environmental risk assessment for chemicals was analyzed as a parameter.

The downloads could be made for the screening models and all the necessary inputs and parameters considered for each were tabulated for comparison.

The study of the high-tier models was based on literature, as they are private models.

## Materiais e métodos

Com base na análise da literatura, as ferramentas de modelagem foram estudadas e divididas em dois grupos:

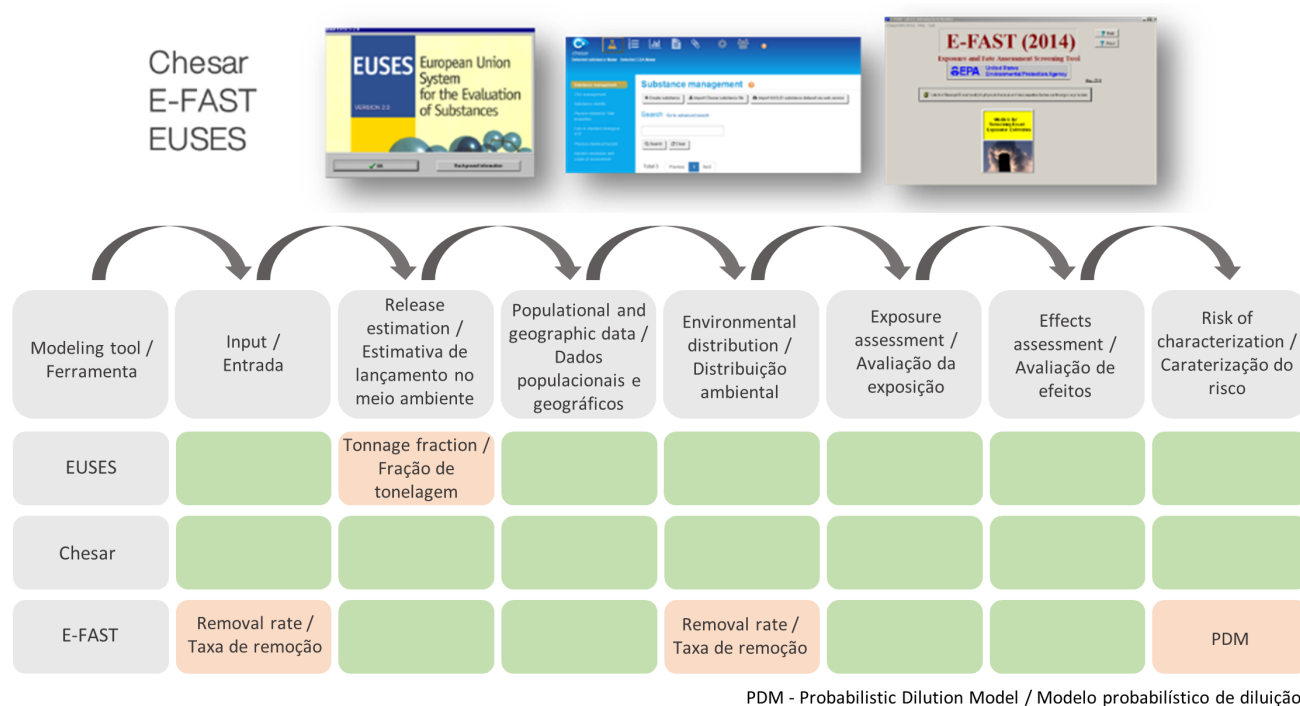
- Modelos de triagem: avaliação conservadora que padroniza os dados.
- Modelos de alto nível: avaliação detalhada que requer mais informações sobre o local a ser avaliado.

Com os estudos da literatura da ECHA, foi possível compreender as quatro etapas necessárias para fazer a avaliação de risco ambiental: Entrada, Estimativa de liberação da substância, Distribuição ambiental e Caracterização do risco, além de outros parâmetros, conforme indicado na Figura 1.

Como parâmetro, foi analisado se as ferramentas seguem os passos da ECHA sobre avaliação de risco ambiental para produtos químicos.

O *download* pôde ser feito para os modelos de triagem e todas as entradas e parâmetros necessários considerados para cada um foram tabulados para comparação.

Para modelos de alto nível o estudo se baseou na literatura por serem modelos privados.



**Figure 1** - Comparison of screening models under the evaluation parameters.

**Figura 1** - Comparação de modelos de triagem sob os parâmetros de avaliação.

## Results and discussion

The ten environmental modeling tools studied follow the European Chemicals Agency Guidance on information requirements and chemical safety assessment (12): environmental exposure assessment is initially based on the evaluation of information on the relevant properties of the substance (physicochemical properties, fate and (eco)toxicological), subsequently on hazard assessment and use mapping.

At a minimum, vapor pressure, water solubility, molecular weight, octanol-water partition coefficient, melting point, and impact of biodegradability on the fate of the substance in the environment are the information necessary for the estimation of environmental exposure.

For the EUSES, Chesar and E-FAST screening models, the four steps for environmental risk assessment could be analyzed in detail:

1. Input data: inclusion in the tools of data identifying the analyte (e.g., molecular weight, partition coefficient, etc.):

In addition to the minimum data reported above, E-FAST requires the removal of effluent treatment for each substance. These data are not easy to find and usually require other tools to obtain them, which makes E-FAST the complex model at this step.

EUSES does not require as complex data as E-FAST, but it requires a great deal of information to run.

On the other hand, in Chesar (an evolution tool of EUSES), all the data may be entered through IUCLID (International Uniform Chemical Information Database - ECHA database), making it the best tool for this step.

2. Estimated release of the substance: considers the amount of use and the exposed population:

EUSES was found to be the most complex tool in this step because while the other modeling tools need only the annual production volume, it needs other data to make an estimate, such as tonnage and chemical analysis.

E-FAST uses the 2003 US population, and this information was considered out-of-date. Thus, Chesar once again was the best model at this stage.

## Resultados e discussão

As dez ferramentas de modelagem ambiental estudadas seguem a Orientação da Agência Europeia de Produtos Químicos sobre requisitos de informação e avaliação de segurança química (12): a avaliação da exposição ambiental é inicialmente baseada na avaliação de informações sobre as propriedades relevantes da substância (propriedades físico-químicas, destino e (eco)toxicológico), posteriormente na avaliação de perigos e mapeamento de usos.

No mínimo, pressão de vapor, solubilidade em água, peso molecular, coeficiente de partição octanol-água, ponto de fusão e impacto da biodegradabilidade no destino da substância no meio ambiente são as informações necessárias para a estimativa da exposição ambiental.

Para os modelos de triagem EUSES, Chesar e E-FAST, foi possível analisar detalhadamente as quatro etapas para avaliação de risco ambiental:

1. Dados de entrada: inclusão nas ferramentas de dados que identificam a substância a ser analisada (por exemplo, peso molecular, coeficiente de partição, etc):

Além dos dados mínimos informados acima, o E-FAST exige a remoção do tratamento de efluentes para cada substância. Esses dados não são fáceis de encontrar e geralmente requerem outras ferramentas para obtê-los, o que torna o E-FAST o modelo complexo nessa etapa.

O EUSES não demanda dados tão complexos quanto o E-FAST, mas demanda muita informação para rodar.

Por outro lado, no Chesar (uma ferramenta de evolução da EUSES) é possível inserir todos os dados através da IUCLID (*International Uniform Chemical Information Database* - base de dados da ECHA), tornando-se a melhor ferramenta para esta etapa.

2. Estimativa de liberação da substância: considera a quantidade de uso e a população exposta:

A EUSES foi considerada a ferramenta mais complexa nesta etapa porque enquanto as outras ferramentas de modelagem precisam apenas do volume anual de produção, ela precisa de outros dados para fazer uma estimativa, como tonelagem e análise química.

O E-FAST usa a população americana de 2003 e esta informação foi considerada antiga. Assim, Chesar mais uma vez foi o melhor modelo nesta etapa.

3. Environmental distribution: considers the location where the substance is disposed:

In addition to effluent removal treatment for each substance, E-FAST requires river flow and is another complex data compared to EUSES and Chesar.

4. Risk characterization: Based on the data reported in Steps 1, 2 and 3, the tools compare actual exposure with ideal exposure:

The risk characterization is different for these tools. While EUSES and Chesar make an environmental risk assessment based on the calculation of the CAP/CENP value, E-FAST uses a program that the assessor needs to enter the days of the period, and the program will determine how often the stream receiving the concentration will exceed the level of concern (LDC).

For the high-level assessment tools (CRAM (Canada), HydroROUT CFM (St. Lawrence R.), GREAT-ER (Europe), STREAM-EU (Europe), ScenAT (World), PhATE™ (USA), iSTREEM® (USA + Ontario)), there are often common assumptions shared and similar key modeling mechanisms. But while in screening models removal and dilution rates are fixed and the worst case scenario is considered, it is possible to modify such factors in the high-level models (13).

A detailed assessment covering the four steps of environmental risk assessment could not be performed as the only one available for download and testing was iSTREEM®.

iSTREEM® is a free tool, a web-based GIS model that estimates the concentration of a chemical going down the drain and the residual levels that subsequently enter the aquatic environment. This publicly available tool can be used to enhance the researcher's ability to estimate chemical concentrations in wastewater treatment plant effluents, surface waters and in many drinking water outlets under mid and low flow conditions. The computer model covers over 240,000 river miles in the United States and includes 13,300 wastewater treatment plants and 1,700 municipal drinking water facilities downstream of the treatment plants (14, 15).

3. Distribuição ambiental: considera o local onde a substância é descartada:

E-FAST, além do tratamento de remoção de efluentes para cada substância requer fluxo de rio e é outro dado complexo comparando com EUSES e Chesar.

4. Caracterização do risco: Com base nos dados relatados em 1, 2 e 3, as ferramentas comparam a exposição real com a exposição ideal:

A caracterização do risco é diferente para essas ferramentas. Enquanto a EUSES e a Chesar fazem avaliação de risco ambiental com base no cálculo do valor CAP/CENP, o E-FAST usa um programa que o avaliador precisa inserir os dias do período e o programa vai determinar com que frequência o córrego que recebe a concentração vai ultrapassar o nível de preocupação (PMD).

Para as ferramentas de avaliação de alto nível (CRAM (Canadá), HydroROUT CFM (St. Lawrence R.), GREAT-ER (Europa), STREAM-EU (Europa), ScenAT (Mundo), PhATE™ (EUA), iSTREEM® (EUA + Ontário)), muitas vezes há suposições comuns compartilhadas e mecanismos de modelagem chave semelhantes. Mas, enquanto nos modelos de triagem as taxas de remoção e diluição são fixas e o pior cenário é considerado, nos modelos de alto nível é possível modificar tais fatores (13).

Uma avaliação detalhada abrangendo as 4 etapas da avaliação de risco ambiental não pode ser realizada, pois o único disponível para *download* e teste foi o iSTREEM®.

iSTREEM® é uma ferramenta gratuita, modelo GIS baseado na *web* que estima a concentração de um produto químico que desce pelo ralo e os níveis residuais que subsequentemente entram no ambiente aquático. Esta ferramenta disponível publicamente pode ser usada para melhorar o pesquisador para estimar as concentrações químicas em efluentes de estações de tratamento de águas residuais, águas superficiais e em muitas saídas de água potável em condições de fluxo médio e baixo. O modelo de computador abrange mais de 240.000 milhas fluviais nos Estados Unidos e inclui 13.300 estações de tratamento de águas residuais e 1.700 instalações municipais de água potável a jusante das estações de tratamento (14, 15).

For the model to calculate the PEC, the user must include:

- the geographical extent to be assessed.
- the charge factor (per person usage rate - g/person/day).
- the removal of wastewater treatment.
- the decomposition rate in the river (k/day).
- the water flow (medium or low).

Wastewater treatment removal can be achieved through another exposure model called SimpleTreat.

The safety assessment starts from the worst-case scenario, and later, if necessary, a more detailed analysis is done for validation.

Thus, even though it was not possible to study the high-level models in depth, the knowledge of the existence of each was of extreme importance for possible future partnerships.

iSTREEM® is a complete and ideal tool for an in-depth environmental safety assessment, should the need arise. That is, if the ingredient is of high environmental risk after the worst-case assessment performed with the screening tools, a more detailed assessment is possible via iSTREEM to understand the impact, considering different dilutions and different geographic locations.

## Conclusion

These results of comparison of environmental modeling tools are unprecedented in the literature and provide the perspective information that can help in the development of safer cosmetics considering the recent exposure scenario.

With this study it was possible to perform detailed evaluation and comparison between environmental modeling screening tools.

The EUSES tool is an old system and is not easy to use, requiring many inputs for evaluation. The E-FAST tool, despite having the closest exposed population to Brazil, uses older (2003 date) and complex data such as effluent treatment removal for each substance. It is also not as complete as EUSES.

Para o modelo calcular o CAP, o usuário deve incluir:

- A extensão geográfica a ser avaliada.
- Fator de cobrança (taxa de utilização por pessoa – g/pessoa/dia).
- Remoção de tratamento de águas residuais.
- Taxa de decomposição no rio (k/dia).
- Selecione o fluxo de água (médio ou baixo).

A remoção do tratamento de águas residuais pode ser alcançada por meio de outro modelo de exposição chamado *SimpleTreat*.

A avaliação de segurança parte do pior cenário e, posteriormente, se necessário, é feita uma análise mais detalhada para validação.

Dessa forma, mesmo não sendo possível estudar a fundo os modelos de alto nível, o conhecimento da existência de cada um deles foi de extrema importância para possíveis parcerias futuras.

O iSTREEM® é uma ferramenta completa e ideal para uma avaliação aprofundada da segurança ambiental, caso seja necessário. Ou seja, se após a avaliação de pior caso realizada com as ferramentas de triagem, o ingrediente for de alto risco ambiental, existe a possibilidade de uma avaliação mais detalhada via iSTREEM e entendimento do impacto, considerando diferentes diluições e diferentes localizações geográficas.

## Conclusão

Esses resultados de comparação de ferramentas de modelagem ambiental são inéditos na literatura e fornecem as informações de perspectivas que podem ajudar no desenvolvimento de cosméticos mais seguros considerando o recente cenário de exposição.

Com este estudo foi possível realizar avaliação detalhada e comparação entre as ferramentas de modelagem ambiental de triagem.

A ferramenta EUSES é um sistema antigo e não é fácil de usar, exigindo muitos insumos para avaliação. A ferramenta E-FAST, apesar de ter a população exposta mais próxima do Brasil, possui dados antigos (data de 2003) e complexos como a remoção do tratamento de efluentes para cada substância. Também não é tão completo quanto o EUSES.



Finally, Chesar is a tool that facilitates data entry. It was considered the easiest tool to use and has clearer and more straightforward application steps. Among the screening tools, the Chesar tool was chosen for the initial assessment of ingredients that demonstrate potential environmental risk.

For the high-level environmental modeling tools, it was not possible to establish a comparison between the chosen models, as the models are private and have little data in the literature. Still, following the rational safety assessment, for a more detailed assessment after the first initial assessment via Chesar, iSTREEM can be used.

### **Author contributions**

All the study was conducted by Caroline Inácio Bianchi and Patrícia Maria Berardo Gonçalves Maia Campos. Both researchers were responsible for the contextualization. Caroline was responsible for both the experimental and writing, while Patrícia was responsible for the supervision of the study and revision of the article.

### **Acknowledgements**

The discussion of this work was supported by Natura&Co LATAM, who has great knowledge on the subject.

### **Conflicts of Interest**

The Editor involved in the authorship of this manuscript had no participation in the review or decision process. Both authors have stated that there are no financial and/or personal relationships that could represent a potential conflict of interest.

Finalmente, Chesar é uma ferramenta que facilita a entrada de dados. Foi considerada a ferramenta mais fácil de usar e possui etapas de aplicação mais claras e diretas. Dentre as ferramentas de projeção, a ferramenta Chesar foi escolhida para a avaliação inicial de ingredientes que demonstram potencial risco ambiental.

Para as ferramentas de modelagem ambiental de alto nível, não foi possível estabelecer uma comparação entre os modelos escolhidos, pois os modelos são privados e possuem poucos dados na literatura. Ainda assim, seguindo a avaliação racional de segurança, para uma avaliação mais detalhada após a primeira avaliação inicial via Chesar, pode-se utilizar o iSTREEM.

### **Contribuição dos autores**

Todo o estudo foi conduzido por Caroline Inácio Bianchi e Patrícia Maria Berardo Gonçalves Maia Campos. Ambas as pesquisadoras foram responsáveis pela contextualização. Caroline foi responsável pela parte experimental e escrita, enquanto Patrícia foi responsável pela supervisão do estudo e revisão do artigo..

### **Agradecimentos**

A discussão deste trabalho contou com o apoio da Natura&Co LATAM que possui grande conhecimento sobre o assunto.

### **Conflito de Interesses**

A Editora presente na autoria deste manuscrito não participou nos processos de revisão e/ou decisão. As autoras declararam não possuir quaisquer relações financeiras ou que possam configurar um potencial conflitos de interesse.

## References / Referências

1. Maia, J. I. B. (2017). Innovation in cosmetics-innovative makeup products: efficacy and safety. [Integrated Master's Degree, University of Lisbon Faculty of Pharmacy]. University of Lisbon Repository. [https://repositorio.ul.pt/bitstream/10451/36037/1/MICF\\_Joana\\_Maia.pdf](https://repositorio.ul.pt/bitstream/10451/36037/1/MICF_Joana_Maia.pdf)
2. Sheth J. (2020). Impact of Covid-19 on consumer behavior: Will the old habits return or die?. *Journal of business research*, 117, 280–283. <https://doi.org/10.1016/j.jbusres.2020.05.059>
3. WHO (World Health Organization). Coronavirus disease (COVID-19) advice for the public. Available at: <https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/advice-for-public>, accessed 28 June 2022.
4. Loxton, M., Truskett, R., Scarf, B., Sindone, L., Baldry, G., & Zhao, Y. (2020). Consumer behaviour during crises: preliminary research on how coronavirus has manifested consumer panic buying, herd mentality, changing discretionary spending and the role of the media in influencing behavior. *Journal of Risk and Financial Management*, 13(8), 166. <https://www.mdpi.com/1911-8074/13/8/166>
5. Duan, Y., Shang, B., Liang, W., Lin, Z., Hu, C., Baker, J. S., Wang, Y., & He, J. (2022). Predicting hand washing, mask wearing and social distancing behaviors among older adults during the covid-19 pandemic: an integrated social cognition model. *BMC geriatrics*, 22(1), 91. <https://doi.org/10.1186/s12877-022-02785-2>.
6. Westbrook, G., & Angus, A. TOP 10 GLOBAL CONSUMER TRENDS 2021. Euromonitor International, 2021. Available at: <https://go.euromonitor.com/white-paper-EC-2021-Top-10-Global-Consumer-Trends.html>, accessed 18 April 2021.
7. Mogelonsky, M. "A pandemia do Covid-19 chegou: Como os consumidores e as indústrias estão reagindo nos EUA?". MINTEL. Available at: <https://brasil.mintel.com/blog/a-pandemia-do-covid-19-chegou-como-os-consumidores-e-as-industrias-estao-reagindo-nos-eua>, accessed 10 September 2020.
8. Cadioli, G.F. & Campos, P. M. (2020). "Os Cosméticos em Tempos de Pandemia". *Cosmetics & Toiletries (Brasil)*, 32 (5), 40-41.
9. SCCS members, & Other experts (2021). The SCCS Notes of Guidance for the testing of cosmetic ingredients and their safety evaluation, 11th revision, 30-31 March 2021, SCCS/1628/21. *Regulatory toxicology and pharmacology : RTP*, 127, 105052. <https://doi.org/10.1016/j.yrtph.2021.105052>
10. ANVISA – Agência Nacional de Vigilância Sanitária. *Guia para Avaliação de Segurança de Produtos Cosméticos, 2ª edition* (2012). ANVISA. <https://www.gov.br/anvisa/pt-br/centraisdeconteudo/publicacoes/cosmeticos/manuais-e-guias/guia-para-avaliacao-de-seguranca-de-produtos-cosmeticos.pdf>
11. Keller, V. D., Williams, R. J., Lofthouse, C., & Johnson, A. C. (2014). Worldwide estimation of river concentrations of any chemical originating from sewage-treatment plants using dilution factors. *Environmental toxicology and chemistry*, 33(2), 447–452. <https://doi.org/10.1002/etc.2441>
12. ECHA. (2016) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment, Chapter R. 16: Environmental exposure assessment.
13. Grill, G., Li, J., Khan, U., Zhong, Y., Lehner, B., Nicell, J., & Ariwi, J. (2018). Estimating the eco-toxicological risk of estrogens in China's rivers using a high-resolution contaminant fate model. *Water research*, 145, 707–720. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.08.053>
14. Wang, X., Homer, M., Dyer, S. D., White-Hull, C., & Du, C. (2005). A river water quality model integrated with a web-based geographic information system. *Journal of environmental management*, 75(3), 219–228. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2004.11.025>
15. Kapo, K. E., DeLeo, P. C., Vamshi, R., Holmes, C. M., Ferrer, D., Dyer, S. D., Wang, X., & White-Hull, C. (2016). iSTREEM(®) : An approach for broad-scale in-stream exposure assessment of "down-the-drain" chemicals. *Integrated environmental assessment and management*, 12(4), 782–792. <https://doi.org/10.1002/ieam.1793>