



UDESC

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS AGROVETERINÁRIAS - CAV
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS AMBIENTAIS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**AVALIAÇÃO DE MODELOS DE
CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A
CATEGORIA *SMOG* FOTOQUÍMICO
CONSIDERANDO O CONTEXTO
BRASILEIRO**

SANDY BERNARDI FALCADI TEDESCO GIROTTO

LAGES/SC, 2018

SANDY BERNARDI FALCADI TEDESCO GIROTTTO

**AVALIAÇÃO DE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A
CATEGORIA SMOG FOTOQUÍMICO CONSIDERANDO O CONTEXTO
BRASILEIRO**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Ciências Ambientais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências Ambientais, da Universidade do Estado de Santa Catarina.

Orientador: Prof. Dr. Flávio José Simioni
Coorientador: Prof. Dr. Valdeci José da Costa

LAGES/SC

2018

Ficha catalográfica elaborada pelo(a) autor(a), com
auxílio do programa de geração automática da
Biblioteca Setorial do CAV/UDESC

Giroto, Sandy Bernardi Falcadi Tedesco

Avaliação de modelos de caracterização de AICV
para a categoria smog fotoquímico considerando o
contexto brasileiro / Sandy Bernardi Falcadi
Tedesco Giroto. - Lages , 2018.
126 p.

Orientador: Flávio José Simioni

Co-orientador: Valdeci José da Costa
Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado
de Santa Catarina, Centro de Ciências
Agroveterinárias, Programa de Pós-Graduação em
Ciências Ambientais, Lages, 2018.

1. Avaliação do Ciclo de Vida. 2. Avaliação de
Impacto do Ciclo de Vida. 3. Métodos de AICV. 4.
Ozônio troposférico. 5. Fator de Caracterização. I.
Simioni, Flávio José . II. Costa , Valdeci José da
. , .III. Universidade do Estado de Santa
Catarina, Centro de Ciências Agroveterinárias,
Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais. IV.
Título.

SANDY BERNARDI FALCADI TEDESCO GIROTTO

**AVALIAÇÃO DE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A
CATEGORIA SMOG FOTOQUÍMICO CONSIDERANDO O CONTEXTO
BRASILEIRO**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Ciências Ambientais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências Ambientais, da Universidade do Estado de Santa Catarina.

Banca examinadora:

Orientador: _____

Prof. Dr. Flávio José Simioni

Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC/CAV

Coorientador: _____

Prof. Dr. Valdeci José da Costa

Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC/CAV

Membros:

Prof. Dr. Gilmar Conte

Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC/CAV

Prof. Dra. Yara de Souza Tadano

Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

Lages, 26 de fevereiro de 2018

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à Deus, por toda proteção, apoio e conforto em todos os momentos. Juntamente agradeço aos meus pais, Leonides T. Girotto e Gilmar Girotto, pelas palavras de apoio, por sempre estarem ao meu lado nas horas difíceis, tristes e alegres, por me lembrarem o que realmente importa na vida: o amor incondicional pela família. Por me ensinarem a lutar e nunca desistir, que com o esforço é possível vencer e conquistar muita coisa na vida. Obrigada por tudo, amo muito vocês.

Agradeço ao meu namorado, companheiro e melhor amigo, Ricardo Mancilio Vieira, por todo amor, carinho, risadas, paciência, pelas conversas e por tudo o que vivemos juntos. Te amo muito. Agradeço aos meus queridos irmãos Marx e Igor, cunhadas Ana Paula e Liliane e todos os familiares, pelas ligações, risadas, visitas, apoio constante e por tudo que vocês significam na minha vida. Agradeço ao meu afilhado Lucca, pelo amor e felicidade que já proporciona. Agradeço também ao meu cunhado+irmão Rodrigo Vieira, pelo apoio, por me acolher, pela paciência, pelas risadas e conversas.

Em especial agradeço aos meus falecidos sogros Estácio Mancilio Vieira e Maria de Fátima C. S. Vieira (*In memoriam*), por me acolherem e me fazer sentir parte da família, aprendi muito com vocês, estarão sempre no meu coração. Agradeço à Deus por ter conhecido e convivido com pessoas tão especiais.

Agradeço aos meus amigos e colegas do Laboratório de Gestão e Economia Ambiental (LabGEA): Roni Severis, Júlia Wahrlich, Lucas Sartor, Artur de Almeida, Gustavo Jarenkow; aos amigos de graduação: Samira Demecio, Lara Serena, Alexandre Correa, Jaque Schmitt, Renan Franchini, Cyntia Ely, Vanessa Demeneck, Vitor Becegato, Josiane Oliveira, e em especial às minhas amigas Tamires Deboni, Flávia Arcari, Fernanda Santos e Ligiane Rocha, por toda ajuda, descontração e ouvido amigo em todos os momentos.

Ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais da Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC/CAV, e a todos os colegas e professores da turma do mestrado, em especial aos professores Dr. Gilmar Conte e Dra. Claudia Guimarães. Agradeço ainda à Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação de Santa Catarina (FAPESC/SC) pela concessão da bolsa de estudos. Agradeço à professora Dra. Yara Tadano, a Dra. Cássia Ugaya e aos demais membros da Rede de Pesquisa em AICV Brasil, pelo incentivo à pesquisa, pela troca de conhecimentos e informações.

Por último, mas não menos importante aos meus orientadores professores Dr. Flávio Simioni, Dr. Valdeci Costa e Dr. Rodrigo Alvarenga pela orientação durante toda pesquisa, pela paciência perante as dificuldades, pela dedicação, por gentilmente nunca negar apoio e auxílio, pela troca de conhecimento, pela amizade e principalmente pelas conversas de incentivo e apoio.

Agradeço também a todos aqueles que de alguma forma contribuíram para que esta pesquisa se concretiza-se.

RESUMO

Na busca pelo desenvolvimento sustentável, a Avaliação do Ciclo de Vida (ACV) é uma ferramenta eficaz, que possibilita uma visão abrangente sobre os potenciais impactos do ciclo de vida dos produtos e/ou processos, auxiliando na redução de impactos ambientais. Esta é composta por quatro etapas: Definição de objetivos e escopo; Análise do inventário; Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida (AICV); e Interpretação. A terceira etapa - a AICV, é composta por modelos matemáticos (modelos de caracterização) que indicam os impactos das cargas ambientais descritas na análise de inventário. A regionalização destes modelos de caracterização é um dos grandes desafios na comunidade científica de ACV, especialmente para certas categorias de impacto ambiental; uma vez que a localização da fonte e as condições do entorno apresentam uma forte influência no destino dos poluentes e na sensibilidade dos possíveis receptores expostos. Atualmente no Brasil, a estrutura metodológica e científica da AICV ainda está em fase de desenvolvimento, sendo que há uma lacuna com relação à categoria de impacto *smog* fotoquímico. Desta forma, esta pesquisa teve como objetivo buscar na literatura e avaliar de forma criteriosa, os modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico. Para então, analisar a possibilidade de recomendação de um destes modelos, caso algum esteja adequado à realidade brasileira. A metodologia consistiu pela busca na literatura, seleção, descrição e análise das características dos modelos de caracterização; e a elaboração de uma tabela de critérios para melhor comparação. Após a avaliação teórica dos modelos, os mesmos foram aplicados em um estudo de caso que teve como objetivo principal visualizar as diferenças nos resultados de cada modelo em um estudo de ACV, como também analisar o potencial de formação de *smog* fotoquímico do transporte de uma tonelada de açúcar por meio de dois modais de transportes (rodoviário e ferroviário), para isso, o *software SimaPro*[®] foi utilizado. Assim, foram selecionados, descritos e comparados de forma criteriosa, 5 (cinco) modelos de caracterização de AICV relacionados à categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico. Observou-se que os modelos apresentam diferenças significativas, ou seja, cada modelo apresenta Fatores de Caracterização (FC) para diferentes categorias dentro da cadeia de impacto ambiental do *smog* fotoquímico (*midpoint* e/ou *endpoint*), cada modelo apresenta diferenças na modelagem, na escala do modelo (regional, continental ou global), na quantidade e qualidade de fluxos elementares, etc. Fatores que influenciam no cálculo dos FC e, conseqüentemente, nos resultados finais de uma ACV, em um mesmo estudo de caso. Sugere-se, com base na tabela de critérios, o modelo de Van Zelm et al. (2016) – Global, como a melhor opção para ser utilizado em estudos de ACV no Brasil. Este modelo foi o que resultou na maior nota referente aos critérios estabelecidos e apresenta resultados em escala global. Contudo, os resultados não descartam a necessidade de estudos de regionalização, para o desenvolvimento de um modelo que apresente resultados e estudos direcionados à realidade brasileira, ou ao ajuste do modelo de Van Zelm et al. (2016) – Brasil.

Palavras-chave: Avaliação do Ciclo de Vida. Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida. Métodos de AICV. Ozônio troposférico. Fator de Caracterização.

ABSTRACT

In the pursuit of sustainable development, the Life Cycle Assessment (LCA) is one effective tool, which provides a comprehensive overview about the potentials impacts of the cycle life of products and/or process, helping to reduce the environmental impacts. This tool is composed of four stages: Definition of objectives and scope; Inventory analysis; Life Cycle Impact Assessment (LCIA); and Interpretation. The third stage - the LCIA, is composed of mathematical models (characterization models) which indicates the impacts of the environmental loads described in the inventory analysis. The regionalization of these characterization models is one of the major challenges in the LCA scientific community, especially for certain environmental impacts categories; because the location of the sources and the surround conditions have a strong influence on the fate of the pollutants and possible sensitivity of receptors exposed. Currently in Brazil, the methodological and scientific LCIA framework is still under development, and there is a gap related to the photochemical *smog* impact category. In this way, the aim of this research was to search in the literature and evaluate carefully the LCIA characterization models for the environmental impact category of photochemical smog. In order to analyze the possibility of recommending one of these models, if any is appropriate to the Brazilian reality. The methodology consisted of searching the literature, selecting, describing and analyzing the characteristics of the characterization models; and the elaboration of a table of criteria for better comparison. After the theoretical evaluation of the models, they were applied in a case study whose main objective was to visualize differences the differences in the results of each model in a LCA study, as well as to analyze the photochemical smog formation potential of the transport of one ton of sugar by means of two modes of transportation (road and rail), for which SimaPro® software was used. Thus, 5 (five) LCIA characterization models related to the category photochemical *smog* were carefully selected, described and compared. It was observed that the models present significant differences, that is, each model presents Characterization Factors (CF) for different categories within the environmental impact chain of the photochemical smog (midpoint and / or endpoint), each model presents differences in modeling, scale of the model (regional, continental or global), quantity and quality of elementary flows, etc. Factors that influence the calculation of the CF and, consequently, the final results of a LCA, in the same case study. Based on the criteria table, suggested that the model of Van Zelm et al. (2016) – World, as the best option to be used in studies of LCA in Brazil. This model resulted in the highest grade referring to the established criteria and presents results on a global scale. However, the results do not rule out the need for regionalization studies, for the development of a model that presents results and studies directed to the Brazilian reality, or to fit the model of Van Zelm et al. (2016) - Brazil.

Key-words: Life Cycle Assessment; Life Cycle Impact Assessment; methods of LCIA; Tropospheric ozone; Characterization Factors.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Estrutura da Avaliação do Ciclo de Vida	24
Figura 2 - Esquema da estrutura da AICV, desde o ICV, às categorias de impacto até os danos no ambiente - <i>midpoint</i> e <i>endpoint</i>	26
Figura 3 - Via de impacto ambiental dos estressores	28
Figura 4 - Mapa dos trajetos de Campinas/SP até o Porto de Santos.....	49
Figura 5 - Cadeia de impacto da formação de <i>smog</i> fotoquímico	52
Figura 6 - Modelo para derivar FC dos impactos à saúde humana causados pelo <i>smog</i> fotoquímico	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Padrões de qualidade do ar com relação à concentração de O ₃ (µg.m ⁻³) no ar, do Decreto Estadual nº 59.113/13 e do CONAMA nº 03/90	34
Tabela 2 - Modelos de caracterização de AICV para <i>smog</i> fotoquímico	40
Tabela 3 - Critérios para comparação e seleção dos modelos de caracterização para a categoria de impacto <i>smog</i> fotoquímico para a realidade brasileira.....	46
Tabela 4 - Base de dados dos transportes utilizados	49
Tabela 5 - FC endpoint para danos à saúde humana causados por mortalidade aguda.....	54
Tabela 6 - FI para danos à saúde humana.....	56
Tabela 7 - Dados de entrada para os cálculos dos FE e FDa e os seus resultados médios (combinados) da Europa atribuíveis as concentrações de O ₃	58
Tabela 8 - Fator de Caracterização do Brasil e média ponderada global do FC	65
Tabela 9 - Fator de Caracterização do Brasil e média ponderada global do FC	70
Tabela 10 - Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos para humanos e ecossistemas de acordo com as substâncias emitidas	75
Tabela 11 - FC (FPA.m ² .ano.kg ⁻¹) para a vegetação natural por COVNM e NO _x para lognormal, média e linear na Europa em 2010.....	78
Tabela 12 - YOLL para a população, resultante da emissão de 1-kton de poluente para o EU-15 (anos 1990 e 2010).....	86
Tabela 13 - Impactos no ambiente criado pelo homem, custos dos danos resultantes das emissões de 1-kton de poluente para o EU-15 (anos 1990 e 2010).....	87
Tabela 14 - Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV selecionados	89
Tabela 15 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização em nível <i>midpoint</i>	91
Tabela 16 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização para danos aos ecossistemas	92
Tabela 17 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização para danos à saúde humana (Continua).....	93
Tabela 18 - Pontuação final dos modelos de caracterização estudados	99
Tabela 19 - Diferenças entre os cálculos do fator de inalação	102
Tabela 20 - Diferenças entre os cálculos do fator de efeito.....	103
Tabela 21 - Diferenças entre os cálculos do fator de dano	103

Tabela 22 - Resultados dos trajetos por modelo de caracterização..... 106

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ACV	Avaliação de Ciclo de Vida
AICV	Avaliação de Impacto de Ciclo de Vida
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
COVNM	Compostos Orgânicos Voláteis Não Metanos
DALY	<i>Disability Adjusted Life Years</i> – Anos de Vida Ajustados por Incapacidade
EC-JRC	<i>European Commission Joint Research Centre</i>
FC	Fator de Caracterização
FDa	Fator de Dano
FDe	Fator de Destino
FE	Fator de Efeito
FI	Fator de Inalação
FN	Fator de Normalização
FX	Fator de Exposição
ICV	Inventário de Ciclo de Vida
kton	quilo tonelada
MP₁₀	Material Particulado com diâmetro aerodinâmico menor ou igual a 10µm
MP_{2,5}	Material Particulado com diâmetro aerodinâmico menor ou igual a 2,5µm
NO	Monóxido de nitrogênio
NO₂	Dióxido de nitrogênio
NO_x	Óxidos de nitrogênio
O₃	Ozônio
PBACV	Programa Brasileiro de Avaliação do Ciclo de Vida
PCOF	Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímico
PFO	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos
PFOE	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Ecossistemas
PFOH	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Humanos
SO₂	Dióxido de enxofre
YLD	<i>Year equivalents Lost Due to Morbidity</i> - Anos Equivalentes Perdidos Devido à Morbidade
YLL	<i>Years of Life Lost</i> - Anos de Vida Perdidos devido morte prematura
YOLL	<i>Years Of Life Lost</i> - Anos de Vida Perdidos devido morte prematura

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	OBJETIVOS.....	21
1.1.1	Objetivo geral	21
1.1.2	Objetivos específicos.....	21
1.2	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	22
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	23
2.1	CONCEITOS DE AVALIAÇÃO DO CICLO DE VIDA - ACV.....	23
2.1.1	Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida - AICV	25
2.1.2	Métodos de AICV e modelos de caracterização	29
2.1.3	AICV no Brasil	30
2.2	CATEGORIA DE IMPACTO FORMAÇÃO DE SMOG FOTOQUÍMICO	31
2.2.1	Impactos da formação de <i>smog</i> fotoquímico.....	32
2.2.2	Processos químicos do <i>smog</i> fotoquímico.....	34
2.2.3	Panorama da categoria de impacto <i>smog</i> fotoquímico na AICV	36
3	MATERIAL E MÉTODOS	39
3.1	SELEÇÃO E DESCRIÇÃO DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO	39
3.2	ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO	41
3.2.1	Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV	42
3.2.2	Critérios para análise comparativa	42
3.3	ESTUDO DE CASO: COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO: uma avaliação no transporte de açúcar no Brasil	47
3.3.1	Seleção e avaliação dos modelos de caracterização	47
3.3.2	Seleção do trajeto e base de dados	48
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	51
4.1	SELEÇÃO E DESCRIÇÃO DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO	51
4.1.1	Modelagem de AICV para <i>smog</i> fotoquímico.....	51
4.1.2	Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2008; 2013) – ReCiPe 2008	53
4.1.2.1	<i>Fator de Caracterização endpoint - danos à saúde humana</i>	<i>53</i>

4.1.2.2	<i>Fator de Caracterização - para COVNM individuais</i>	58
4.1.2.3	<i>Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2013) – ReCiPe 2008</i>	59
4.1.3	Modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999) - método CML-IA baseline	60
4.1.3.1	<i>Descrição do Mecanismo Químico Principal (MQP)</i>	61
4.1.3.2	<i>Valores de PCOF para os 120 compostos orgânicos</i>	62
4.1.4	Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2016) - ReCiPe 2016	64
4.1.4.1	<i>Fator de Caracterização endpoint - danos à saúde humana</i>	65
4.1.4.2	<i>Fator de Caracterização endpoint - danos aos ecossistemas</i>	69
4.1.4.3	<i>Fator de Caracterização midpoint – PFOH e PFOE</i>	73
4.1.5	Modelo de caracterização de Van Goethem et al. (2013)	77
4.1.5.1	<i>Fator de Caracterização endpoint - danos aos ecossistemas</i>	78
4.1.6	Modelo de Krewitt et al. (2001) - EcoSense	83
4.1.6.1	<i>Impactos à saúde humana – Fator de dano</i>	85
4.1.6.2	<i>Impactos no ambiente artificial – Fator de dano</i>	86
4.2	ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A CATEGORIA SMOG FOTOQUÍMICO	87
4.2.1	Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV	88
4.2.2	Critérios para análise comparativa	90
4.2.2.1	<i>Pontuação final das tabelas de critérios</i>	99
4.2.2.2	<i>Análise específica dos modelos Van Zelm et al. (2008; 2016)</i>	100
4.2.3	Fatores que influenciam nos cálculos do FC	104
4.3	ESTUDO DE CASO: COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO: uma avaliação no transporte de açúcar no Brasil	106
5	CONCLUSÃO	111
	REFERÊNCIAS	115

1 INTRODUÇÃO

Com o aumento da população e o aumento pela demanda por bens de consumo, a busca e extração de matérias primas vem crescendo consideravelmente. Consequentemente, os impactos ambientais aumentam, tanto relacionados aos danos aos ecossistemas, mudanças climáticas que vêm sendo cada vez mais perceptíveis, mas também impactos diretos e indiretos na saúde humana, o que implica na redução da qualidade de vida. Com isso, a Organização das Nações Unidas (ONU) desenvolveu o conceito de desenvolvimento sustentável, que é "o desenvolvimento que satisfaz as necessidades do presente sem comprometer a capacidade das gerações futuras de suprir suas próprias necessidades" (ONU, 1987).

Desde então, pesquisas voltadas ao desenvolvimento sustentável vêm sendo realizadas, com o objetivo de reduzir os impactos ambientais e sociais. Uma forma de maximizar os estudos é por meio de ferramentas que quantificam os impactos do ciclo de vida dos produtos, e/ou processos. Uma dessas ferramentas é a Avaliação do Ciclo de Vida (ACV), que segundo a Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT) é um instrumento eficaz, que possibilita uma visão abrangente sobre os potenciais impactos. A ACV foi padronizada pela Organização Internacional de Normalização (do inglês: *International Organization for Standardization* - ISO) e é dividida em quatro etapas: (1) Definição do objetivo e escopo, (2) Análise de inventário de Ciclo de Vida (ICV), (3) Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida (AICV), e (4) Interpretação dos resultados (ABNT, 2009a,b).

Segundo Baumann e Tillman (2004), a etapa de AICV tem como objetivo quantificar/mensurar, ou pelo menos indicar, os impactos das cargas ambientais descritas na análise de inventário. Para o cálculo de cada impacto, existem métodos de AICV, compostos por modelos matemáticos (modelos de caracterização), onde os valores da ICV são compilados em unidades de referência (EC-JRC, 2011), para então continuar com as etapas seguintes da ACV, facilitando assim o entendimento dos impactos.

Um dos desafios científicos na comunidade de ACV é a regionalização dos métodos de AICV (BARE, 2010; FINNVEDEN et al., 2009; HAUSCHILD et al., 2006). Uma vez que a localização da fonte e as condições do entorno apresentam uma forte influência no destino dos poluentes e na sensibilidade dos possíveis receptores expostos (HAUSCHILD et al., 2006). As categorias de impacto também podem ser distintas em cada região, por exemplo, uma categoria de impacto que é importante na Europa, pode não ser relevante no Brasil. Portanto, é necessário

que os métodos e seus modelos de caracterização representem a realidade brasileira, incluindo as categorias de impactos mais relevantes (BRASIL, 2010).

Métodos e modelos de caracterização regionalizados de AICV já foram desenvolvidos em uma escala continental e regional para diferentes regiões do mundo, como também em escala global. Assim, praticantes de ACV podem escolher diferentes modelos de caracterização de AICV para diferentes categorias de impacto. Contudo, há grandes diferenças entre os modelos encontrados na literatura, com isso surgem dois problemas: (1) diferentes modelos de caracterização resultam em diferentes resultados para o mesmo estudo de caso e; (2) as incertezas nos resultados encontrados são altas (RENOU et al., 2008). Mendes (2013) comenta que não é possível afirmar que os procedimentos e parâmetros utilizados por estes modelos são capazes de representar e avaliar os potenciais de impactos ambientais regionalizados em todo o mundo.

No Brasil, a ACV encontra-se em período de expansão de uso, ao contrário de outros países, como Japão e alguns países da Europa, onde a ACV já faz parte do cotidiano da gestão ambiental nas empresas e também é utilizada na formulação de políticas públicas voltadas para a sustentabilidade. A estrutura metodológica e científica da AICV no Brasil também está em desenvolvimento, sendo que as pesquisas voltadas aos modelos de caracterização se encontram em estágios diferentes, conforme as categorias de impacto. Assim, estudos de ACV no Brasil são realizados utilizando as metodologias de AICV e banco de dados de outros países, gerando subjetividade nesta fase, tal como na escolha de um método de AICV, na modelagem do modelo de caracterização e na avaliação das categorias de impacto (ABNT, 2009a).

Perante as problemáticas apresentadas, em dezembro de 2010 foi aprovado pelo Conselho Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial (CONMETRO), o Programa Brasileiro de Avaliação do Ciclo de Vida (PBACV), o qual foi instituído e é conduzido pelo Instituto Brasileiro de Informações em Ciências e Tecnologia (IBICT) e pelo Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO). O programa tem como objetivo apoiar o desenvolvimento da metodologia de ACV no Brasil, para fazer com que a indústria brasileira consiga mostrar ao mercado exterior o perfil ambiental de seu produto, por exemplo, a partir de uma Declaração Ambiental de Produto (DAP), baseada na ACV (BRASIL, 2016; MARTINELLI e REZENDE, 2016).

O PBACV abrange quatro temas estratégicos, onde o segundo é relacionado à AICV. Seus objetivos são: pesquisar e definir as categorias de impacto relevantes para a realidade brasileira; identificar os modelos de caracterização de impacto, coletar, atualizar e

disponibilizar os dados necessários e; identificar os métodos de AIVC existentes, realizando adequações para estabelecer um método de AICV para o Brasil (BRASIL, 2010).

Atualmente, no Brasil, a estrutura metodológica e científica da AICV ainda está sendo desenvolvida, sendo que modelos de caracterização das categorias de impacto estão em estágio diferentes de desenvolvimento. Contudo, há uma lacuna com relação à categoria de impacto *smog* fotoquímico.

Desta forma, esta pesquisa possui subsídio para o PBACV, com o intuito de fornecer informações sobre os modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto *smog* fotoquímico. Assim, pesquisas futuras nesta categoria de impacto podem fazer uso das informações presentes nesta dissertação (descrições dos modelos de caracterização, comparação, revisão bibliográfica, etc.).

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

O objetivo desta pesquisa foi analisar modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto ambiental Ozônio Fotoquímico (*smog* fotoquímico).

1.1.2 Objetivos específicos

Para atingir o objetivo geral, os objetivos específicos foram:

- a) Buscar os modelos de caracterização de AICV da categoria *smog* fotoquímico disponíveis na literatura;
- b) Avaliar, de forma criteriosa, os modelos de caracterização de AICV;
- c) Aplicar os modelos de caracterização de AICV selecionados em um estudo de caso, o qual consiste em analisar o potencial de formação de *smog* fotoquímico do transporte de uma tonelada de açúcar de Campinas/SP até o Porto de Santos, por meio de dois modais de transporte (rodoviário e ferroviário);
- d) Recomendar modelos de caracterização de AICV da categoria *smog* fotoquímico para se utilizar no Brasil.

1.2 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A estrutura da dissertação está dividida em cinco capítulos, dispostos da seguinte maneira:

- Introdução: presente no primeiro capítulo, onde apresenta a introdução da dissertação, com a contextualização do tema, a justificativa e os objetivos da pesquisa;
- Revisão bibliográfica: representando o segundo capítulo, onde contém uma revisão bibliográfica sobre ACV, AICV; AICV no Brasil, e sobre a categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico, como também um panorama da categoria de impacto *smog* na AICV;
- Material e métodos: contém os materiais e métodos adotados no desenvolvimento da pesquisa;
- Resultados e as discussões: o quarto capítulo apresenta os resultados e as discussões da pesquisa, onde apresenta a seleção e descrição dos modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, a análise comparativa dos modelos e o estudo de caso aplicado nos modelos presentes neste estudo.
- Conclusões: o quinto capítulo apresenta as conclusões obtidas durante a realização da pesquisa.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta sessão apresenta a revisão bibliográfica dos assuntos abordados na dissertação. Inicia com a apresentação dos conceitos de ciclo de vida e de ACV (Avaliação do Ciclo de Vida), seguindo por uma revisão do conceito AICV (Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida) e uma visão geral da AICV no Brasil, abordando trabalhos semelhantes para outras categorias de impacto.

Em um segundo tópico, os conceitos sobre a categoria de impacto formação de *smog* fotoquímico foram abordados, levando em consideração o que é o *smog* fotoquímico, seus impactos na saúde humana e no meio ambiente, as principais reações químicas de formação do *smog* fotoquímico, como também, um panorama da categoria de impacto *smog* fotoquímico dentro da AICV.

2.1 CONCEITOS DE AVALIAÇÃO DO CICLO DE VIDA - ACV

Para Vigon (1993), o ciclo de vida pode ser definido como o conjunto de etapas necessárias para que um produto cumpra sua função, compreendido desde a obtenção dos recursos naturais até sua disposição final, logo após haver se esgotado o cumprimento da função. A partir desse conceito, a ACV surgiu como uma metodologia para avaliar os impactos ambientais (potenciais) causados por um produto ou processo durante todo o seu ciclo de vida ou cadeia de produção. Esta abordagem permite a estimativa dos impactos ambientais acumulados ao longo deste ciclo, oferecendo uma visão abrangente e possibilitando melhor compreensão do sistema (SEO e KULAY, 2006).

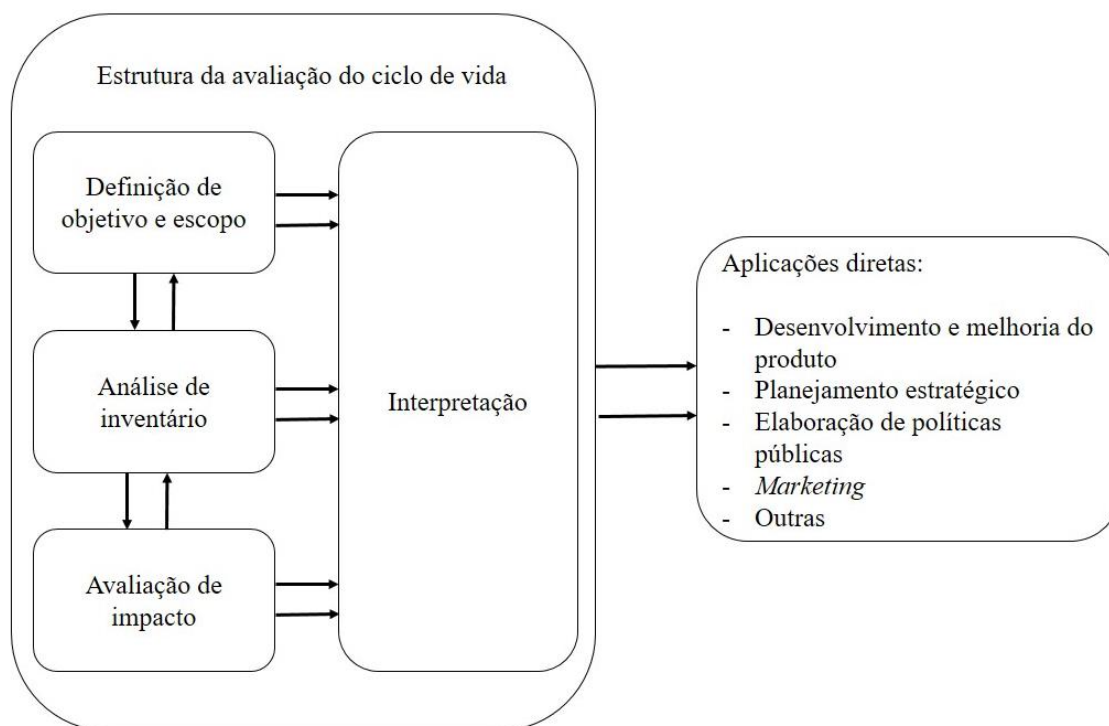
Seo e Kulay (2006) destacam que esta metodologia auxilia na tomada de decisões e indica oportunidades de melhorias, possui aplicação na gestão ambiental e na prevenção da poluição dentro da cadeia produtiva estudada. Logo, a ACV pode potencializar a competitividade e o marketing das empresas, uma vez que também pode ser usada para se adquirir rótulos ambientais, que garantem um bom desempenho do produto em termos ambientais, a partir do ciclo de vida.

Devido a esta importância, em 1997, a ACV foi padronizada pela *International Organization for Standardization* (ISO) na série ISO 14000. Desde então, diversas normas vêm sendo lançadas, dentre elas, a NBR ISO 14040: 2009 (Gestão Ambiental – Avaliação do Ciclo

de Vida – Princípios e estrutura) e a 14044: 2009 (Gestão Ambiental – Avaliação do Ciclo de Vida – Requisitos e orientações), as quais foram revisadas em 2009.

Estas normas definem a ACV como sendo a compilação das entradas, saídas e todos os potenciais impactos ambientais consequentes de um sistema de produto, ao longo de todo o seu ciclo de vida, indicando diretrizes e orientando as necessidades da sua elaboração, porém não determinam o modelo detalhado da ACV (ABNT, 2009a,b). Segundo a ABNT (2009b), a metodologia ACV possui uma estrutura que contém 4 (quatro) etapas a serem seguidas, presentes na Figura 1, como também suas aplicações diretas.

Figura 1 - Estrutura da Avaliação do Ciclo de Vida



Fonte: ABNT (2009b).

A primeira etapa refere-se à definição dos objetivos e escopo do estudo, na qual se deve relatar quais as razões do estudo, qual a aplicação pretendida, o público alvo, a possibilidade de interação e a divulgação dos resultados. No que se refere ao escopo, deve-se deixar claro qual será a área de abrangência do sistema de estudo, suas fronteiras, as funções do sistema, os métodos de AICV, como será realizada a fase de interpretação, requerimentos de dados, suposições, limitações, etc. O nível de detalhamento do estudo vai depender do objeto e do uso pretendido para o estudo (ABNT, 2009a,b).

A etapa de análise do ICV (Inventário do Ciclo de Vida), conforme ABNT (2009b), refere-se à coleta e quantificação de todas as variáveis envolvidas durante o ciclo de vida do produto, atividade ou processo associado ao sistema em estudo. Segundo Picoli (2014), esta etapa consiste na “compilação de entradas e saídas de um sistema de produção e emissões provenientes do processo desses recursos, sempre em função de uma unidade de referência”, onde primeiramente é realizada a coleta de dados, seguida pela organização dos mesmos para os cálculos posteriores.

Segundo ABNT (2009b) a terceira etapa, AICV, consiste na avaliação qualitativa e quantitativa das análises do ICV, buscando avaliar a magnitude e a significância deles. Trata-se de uma abordagem relativa, baseada em uma unidade funcional, ou seja, nesta etapa todas as entradas e saídas são compiladas em unidades equivalentes, conforme sua respectiva categoria de impacto (esta etapa será abordada com mais detalhes no item 2.1.1).

Na última etapa, interpretação, as constatações do ICV e do AICV são consideradas em conjunto, conforme o objetivo e o escopo definidos, visando promover informações que possam auxiliar nas conclusões e recomendações para as tomadas de decisões (ABNT, 2009a,b; ALVARENGA, 2010).

2.1.1 Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida - AICV

A ABNT (2009a) descreve a AICV como a “fase da avaliação do ciclo de vida dirigida à compreensão e à avaliação da magnitude e significância dos impactos ambientais potenciais de um sistema de produto”. O objetivo da AICV descrito pela ABNT (2009a) é “estudar a significância dos impactos ambientais potenciais, utilizando os resultados do Inventário do Ciclo de Vida. Em geral, esse processo envolve associar dados de inventário com categorias de impacto específicas e indicadores de categoria, tentando dessa forma entender tais impactos”.

Baumann e Tillman (2004) comentam que um dos propósitos da AICV é transformar os resultados do inventário, em informações ambientalmente relevantes, ou seja, informações sobre os impactos ambientais, em vez de apenas informações sobre as emissões e a utilização de recursos. Assim, após o cálculo de todas as entradas e saídas do sistema, na AICV compilam-se os valores em uma unidade de referência para cada impacto, para então, continuar com as etapas seguintes da ACV, de forma a facilitar o entendimento de cada impacto (EC-JRC, 2011). Esta compilação é realizada para cada entrada e saída, cada aspecto ambiental (ou fluxo elementar) é transformado em unidades equivalentes de impacto ambiental, por exemplo: os

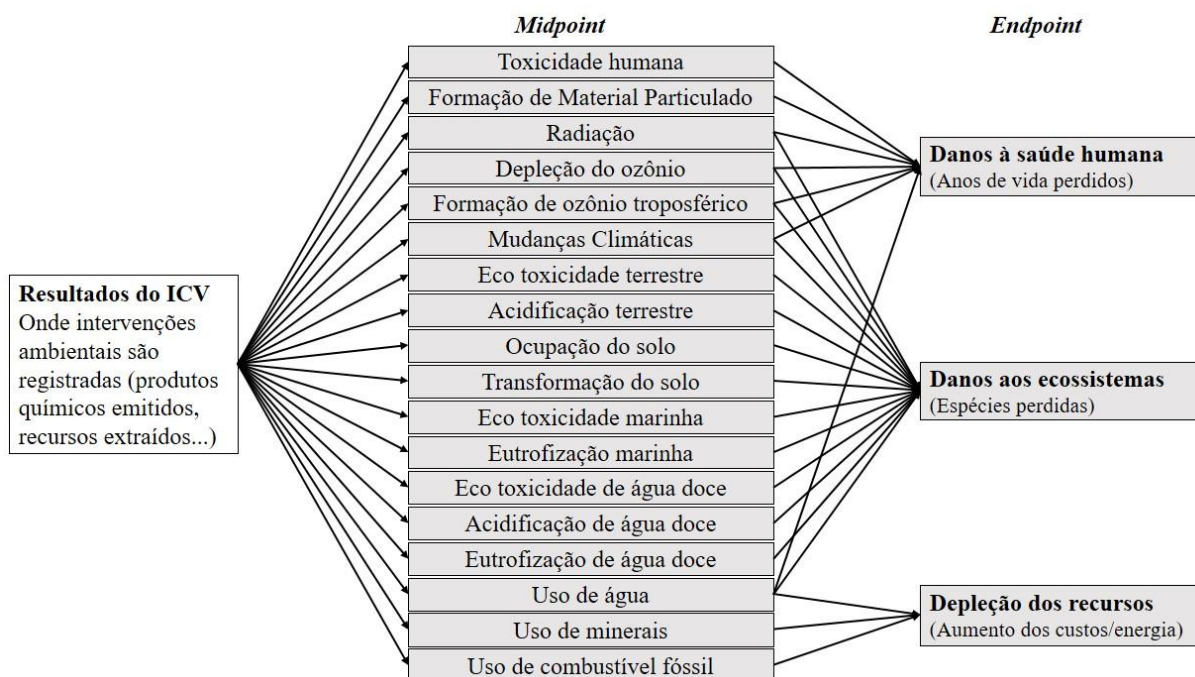
aspectos ambientais coletados no ICV, como o dióxido de carbono (CO₂), metano (CH₄) e óxido nitroso (N₂O), são transformados em impacto nas mudanças climáticas através do indicador kg CO₂eq.

A fase de AICV também inclui a coleta de resultados dos indicadores para diferentes categorias de impacto, que em conjunto representam o perfil de AICV para o sistema de produto. Estas categorias de impacto são classes que representam as questões ambientais relevantes, às quais os resultados da análise do ICV podem ser associados (ABNT, 2009b).

Para a realização da AICV, a ABNT (2009b) fornece etapas/elementos que facilitam o estudo, sendo que três são obrigatórios em todos os estudos de ACV:

- Seleção das Categorias de Impacto, indicadores das categorias e modelos de caracterização: deve ser realizada de forma a cumprir o objetivo e o escopo da ACV, (a Figura 2 fornece uma visão geral das principais categorias de impacto utilizadas em estudos de ACV);
- Classificação: onde ocorre a correlação dos resultados da ICV às categorias de impacto selecionadas;
- Caracterização: cálculo dos resultados dos indicadores das categorias.

Figura 2 - Esquema da estrutura da AICV, desde o ICV, às categorias de impacto até os danos no ambiente - *midpoint* e *endpoint*



Fonte: Adaptado de Van Zelm (2010).

Existem ainda outras três etapas/elementos que são opcionais, em que, a sua adoção fica a cargo de quem realiza o estudo de ACV:

- Normalização: é o cálculo da magnitude dos resultados dos indicadores de categoria com relação a alguma informação de referência;
- Agrupamento: é a junção das categorias de impacto em um ou mais conjuntos, conforme predefinido na etapa de objetivo e escopo;
- Ponderação: as diferentes categorias de impacto ambiental e/ou áreas de proteção são classificadas de acordo com sua importância.

Na caracterização, o impacto de cada emissão ou consumo de recursos é modelado quantitativamente. Conforme ABNT (2009b), o cálculo dos indicadores envolve a conversão dos resultados do ICV para unidades comuns e, a agregação dos resultados convertidos da mesma categoria de impacto.

O tamanho do impacto ambiental é calculado por categoria de impacto, usando um Fator de Caracterização (FC) ou Fator de Equivalência (termos utilizados por diferentes autores, neste trabalho o termo FC será utilizado) definido ao modelar a cadeia de causa e efeito (BAUMANN e TILLMAN, 2004). O FC é o resultado da pontuação do impacto, expresso em uma unidade comum para todas as contribuições dentro da determinada categoria de impacto. Por exemplo, kg de CO₂ equivalentes para gases de efeito estufa contribuindo para a categoria de impacto “Mudanças Climáticas”. Neste caso, o FC das diferentes substâncias é normalizado em função do CO₂, sendo então, o FC de CO₂ para a mudança climática igual a 1, enquanto o metano tem um FC superior a 20, refletindo o seu maior potencial de mudança climática (EC-JRC, 2010).

O cálculo do impacto ambiental (*Impact Scores* - IS), segundo Van Zelm (2010), pode ser realizado utilizando a equação (1).

$$IS = \sum_i \sum_x M_{x,i} \times FC_{x,i} \quad (1)$$

Onde: a quantidade de uma substância emitida ou a quantidade de recurso extraído (M), de uma atividade x, em um compartimento i, é multiplicado por cada FC de uma atividade x, em um compartimento i.

A intervenção ambiental de um estressor leva à efeitos e danos ambientais, após seu destino e exposição no meio ambiente. Portanto, o FC é obtido pela multiplicação do Fator de Destino (FDe), do Fator de Exposição (FX), do Fator de Efeito (FE) e do Fator de Dano (FDa),

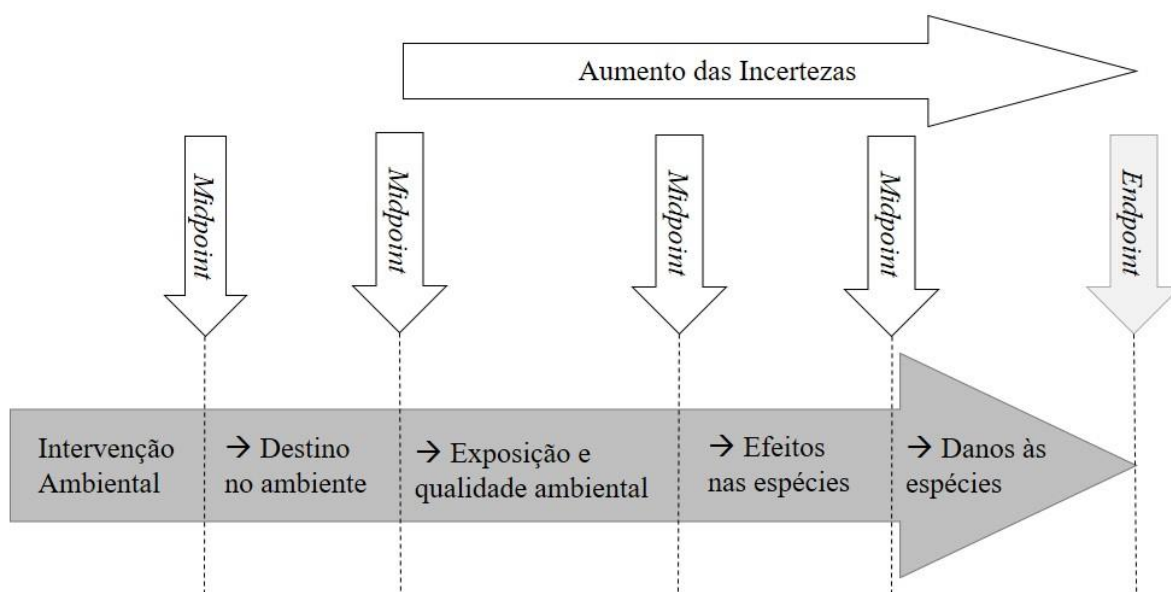
sendo que cada categoria de impacto pode apresentar o cálculo do FC com os fatores que melhor a expressam, conforme equação (2).

$$FC = FDe \times FX \times FE \times FDa \quad (2)$$

Os efeitos nas várias categorias de impacto podem ser atribuídos às principais áreas que a sociedade determina serem dignas de proteger, denominadas por Áreas de Proteção (AoP). As AoP que geralmente são incluídas nos métodos AICV são: saúde humana, ambiente natural e recursos naturais. Estas são mais conhecidas como vias de impacto *endpoint*, enquanto os efeitos dentro das categorias de impacto são *midpoint*, como se observa na Figura 2 (BAUMANN e TILLMAN, 2004; VAN ZELM, 2010).

A Figura 3 fornece uma visão geral da via de impacto ambiental dos estressores, onde em estudos de caso de ACV, os impactos *midpoint* são usados para expressar os impactos relativos dos estressores em relação a outro, dentro de uma categoria de impacto. O principal motivo para aplicar uma abordagem *endpoint*, no entanto, é que ela oferece a possibilidade de analisar as compensações entre as consequências de diferentes impactos e a agregação destas consequências (UDO DE HAES et al., 2002, apud GOEDKOOP et al., 2013; VAN ZELM, 2010). À medida em que mais dados de entrada e mais pressupostos de modelagem são necessários para indicadores *endpoint* (em comparação com indicadores *midpoint*), mais incertezas nos parâmetros serão anexadas à modelagem de *endpoint*, segundo Van Zelm (2010).

Figura 3 - Via de impacto ambiental dos estressores



Fonte: Adaptado de Van Zelm (2010).

2.1.2 Métodos de AICV e modelos de caracterização

Os métodos de AICV são metodologias utilizadas para os cálculos dos resultados finais de ACV, que muitas vezes são muito complexos. Estes métodos auxiliam na interpretação dos resultados do ICV, resultando em uma estimativa quantitativa dos efeitos ambientais (SANTOS, 2006), otimizando e facilitando a etapa de AICV.

Estes métodos de AICV são compostos por modelos de caracterização para cada categoria de impacto, que consideram FC específicos, os quais foram e vêm sendo desenvolvidos por especialistas de diferentes regiões do mundo, como Estados Unidos da América (EUA), Europa, Holanda, Japão, etc. Segundo Hauschild e Huijbregts (2015), FC são calculados usando modelos de caracterização e relacionando ou traduzindo o fluxo elementar de seu impacto sobre o indicador escolhido para a categoria de impacto. Os modelos de caracterização serão explicados no Capítulo 4.

Cada método apresenta pequenas diferenças no modelo de caracterização, e com relação à categoria *smog* fotoquímico, elas podem ser em relação às condições meteorológicas, às substâncias incluídas, dentre outras especificidades que compõem os seus FC (EC-JRC, 2011). Por isso, deve-se tomar cuidado com a escolha de um método que se adeque às características da região de estudo, pois diferentes métodos podem apresentar resultados diferentes em uma mesma região de estudo. Alguns destes métodos que são descritos e estudados por EC-JRC (2011), para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, estão citados a seguir:

- CML2002: o Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímico (PCOF), tem base no modelo do Reino Unido usando uma descrição simplificada do transporte atmosférico. Apresenta resultados em nível *midpoint*.
- EcoSense: faz uma análise focando primeiramente nas emissões da Europa, mas também usa a primeira versão do modelo para a América Latina e Ásia, para comparar fatores de danos à saúde humana entre os continentes, em nível *endpoint* (para *smog*).
- EDIP97: método para o continente Europeu, que adota uma distinção entre áreas com alta e baixa concentração de Óxidos de Nitrogênio - NO_x, para estimar a formação de ozônio em regiões de baixo NO_x. Apresenta resultados em nível *midpoint*.
- EPS2000: fornece resultados em nível *endpoint* para danos na saúde humana, danos nas florestas e danos no cultivo, para o ambiente europeu.
- LIME: para *midpoint*, o modelo de formação de ozônio considera 8 tipos de Compostos Orgânicos Voláteis (COVs), expressos em kg C₂H₄ eq. (etileno equivalente). Para

endpoint, considera os impactos finais na sociedade e no meio ambiente. O método é calibrado para sete regiões Japonesas.

- ReCiPe: método elaborado para o continente europeu. Apresenta resultados em nível de *midpoint* e *endpoint* para a categoria de impacto estudada (*smog* fotoquímico). Faz uso do modelo de caracterização elaborado por Van Zelm et al. (2008).
- TRACI: elaborado para estudos realizados nos EUA, apresentando resultados em nível *midpoint*.

2.1.3 AICV no Brasil

Estudos relacionados à seleção de métodos de AICV e seus respectivos modelos de caracterização, abrangendo uma ou mais categorias de impacto já foram realizados, para diferentes regiões do mundo, como também para o Brasil.

No Brasil, o estudo dos modelos de caracterização é recente, porém algumas pesquisas foram e vêm sendo realizadas referentes a categorias de impacto específicas. Dentre elas pode-se citar:

- Pegoraro (2008) teve como propósito desenvolver um método para o cálculo de FC para a categoria de impacto toxicidade humana, que está ligada à potencialidade cancerígena e não cancerígena das substâncias químicas relacionadas a todo o ciclo de vida de um determinado produto, processo e ou atividade;
- Souza (2010) propôs um modelo de caracterização de impactos do uso da terra, segundo indicadores de biodiversidade, em AICV: por meio do cálculo de fatores de caracterização para ecoregiões brasileiras;
- Marroquín (2013) trabalhou com adequações dos modelos de caracterização para a categoria de impacto uso do solo para as condições do Brasil, por meio da adaptação de FC;
- Mendes (2013) analisou as características e a aplicabilidade dos principais métodos de AICV, e verificou o escopo dos modelos de caracterização para a categoria de impacto acidificação, a fim de fornecer subsídios para a aplicação no Brasil;

- Pavan et al. (2016) realizaram uma avaliação de impactos do uso da terra em serviços ecossistêmicos e fizeram uma recomendação de métodos de AICV para o Brasil;
- Alvarenga et al. (2016) avaliaram 19 métodos de AICV para a categoria de impacto depleção de recursos abióticos, por meio de dois critérios (robustez científica e escopo). Para esta comparação, os autores aplicaram os métodos em um estudo de caso de produção de etileno, e fizeram a recomendação de um destes métodos para o contexto brasileiro;
- Almeida Neto et al. (2016) recomendam métodos de contabilização de recursos para o contexto brasileiro e;
- Castro et al. (2016) recomendaram modelos de caracterização mais apropriados ao contexto brasileiro para avaliação de impacto na escassez hídrica.

Com relação à categoria de impacto *smog* fotoquímico, ainda há uma lacuna na recomendação de modelos de caracterização para uso no Brasil e, na recomendação de modelos de caracterização que podem ser reproduzidos para a realidade brasileira.

2.2 CATEGORIA DE IMPACTO FORMAÇÃO DE SMOG FOTOQUÍMICO

O *smog* fotoquímico caracteriza-se pela formação de uma névoa seca, rica em diversos compostos orgânicos oxigenados, denominados oxidantes fotoquímicos, e de uma grande quantidade de radicais livres, isto é, espécies químicas altamente reativas devido aos seus elétrons desemparelhados (SANTOS, 2006).

O ozônio, principal e mais reativo gás do *smog* fotoquímico, é incolor, inodoro nas concentrações ambientais e é um composto fotoquímico secundário, logo, não é emitido diretamente. Sua formação ocorre a partir de reações fotoquímicas (radiação solar) e outros compostos emitidos para a atmosfera por fontes difusas (veículos) e/ou pontuais (indústrias) (BAIRD e CANN, 2011). Quando formado na estratosfera, o ozônio é um gás essencial, pois filtra os raios ultravioletas emitidos pelo sol, que são nocivos à saúde. Porém, quando formado na baixa troposfera é extremamente tóxico e perigoso à saúde da população e ao meio ambiente (BAUMANN e TILLMAN, 2004).

O *smog* fotoquímico é um fenômeno comum no mundo moderno, é dependente das condições meteorológicas e de certas concentrações de poluentes. Para a sua formação é necessário que o local fique sobre várias condições específicas. Primeiro, é necessário um

tráfego intenso de veículos emitindo NO_x , monóxido de carbono, hidrocarbonetos e COVs. Segundo, deve haver ampla incidência de radiação solar (calor) para que ocorra as reações fotoquímicas em velocidade elevada. Por fim, o ar deve estar estagnado, não haver movimentação ascendente da massa de ar, para que não ocorra a diluição dos poluentes (BAIRD e CANN, 2011). Os mesmos autores dão exemplos das cidades de Los Angeles, Denver, México, Tóquio, Atenas, São Paulo e Roma, que por razões geográficas (presença de montanhas) e por se adequarem às situações acima, estão sujeitas a frequentes episódios de *smog* fotoquímico.

Segundo Rocha et al. (2009), a emissão de precursores inicia-se antes do nascer do sol, quando as pessoas estão iniciando suas atividades diárias, o crescente tráfego de veículos aumenta a emissão de monóxido de nitrogênio (NO) e COVs. Com o nascer do sol, o NO é oxidado a dióxido de nitrogênio (NO_2) e os COVs reagem, formando aldeídos e oxidantes. No período de maior insolação (entre 12h e 16h), estas reações atingem seus máximos. Neste período ocorrem as maiores concentrações de oxidantes na atmosfera.

2.2.1 Impactos da formação de *smog* fotoquímico

O fenômeno pode se estender de um problema local, para um problema regional, ou até mesmo em uma escala continental, quando as emissões de NO_x e hidrocarbonetos são muito difundidas ou o ozônio (O_3) é transportado pelo vento (BAUMANN e TILLMANN, 2004). A *American Lung Association* (2013) enfatiza que o ozônio é um dos gases poluentes com maior capacidade de difusão e mais perigoso. Sendo assim, este poluente pode entrar em contato com um grande número de indivíduos e com diversos ecossistemas. Isso porque o tempo de residência dos oxidantes fotoquímicos na atmosfera é de aproximadamente dois dias, podendo se espalhar por distâncias consideráveis devido à ação do vento (FIORE et al., 2002).

Os impactos negativos dos poluentes fotoquímicos gerados são devido à sua natureza reativa, que lhes permite oxidar moléculas orgânicas. Santos (2006) aponta que os radicais livres, responsáveis pela propagação das reações em cadeia da formação do *smog* fotoquímico, também provocam danos à saúde humana e aos ecossistemas, pois são ativos biologicamente.

Segundo a *United Nations Environment Programme* (UNEP), o ozônio é particularmente perigoso para crianças, idosos e pessoas com doença pulmonar ou cardiovascular, e pode piorar bronquite, enfisema, asma e doenças de pele. Estudos recentes também ligaram a exposição de ozônio, a curto e a longo prazo, à morte prematura, ataques

cardíacos, acidentes vasculares cerebrais, doenças cardíacas, insuficiência cardíaca congestiva e possíveis danos reprodutivos e de desenvolvimento (UNEP, 2016).

Impactos em seres humanos surgem quando o ozônio e outros compostos reativos são inalados e entram em contato com a superfície do trato respiratório, onde danificam o tecido e causam doenças respiratórias, podendo desenvolver ou agravar casos de asma (EC-JRC, 2010).

Impactos sobre a vegetação surgem quando os compostos reativos atacam as superfícies das plantas ou entram nos estômatos das folhas das plantas, e causam danos oxidativos em organelas fotossintéticas (EC-JRC, 2010).

A *United Nations Environment Programme* (UNEP), em parceria com o *Climate and Clean Air Coalition* (CCAC), desenvolveram uma avaliação integrada de poluentes climáticos de curta duração na América Latina e no Caribe. Concluem que para as quatro grandes culturas - soja, trigo, milho e arroz - a exposição ao ozônio troposférico em 2010, resultou em perdas de culturas de aproximadamente 7,4 milhões de toneladas, e estas perdas podem ascender, sendo, os três países, da América Latina, que representam as maiores porções de perdas são Argentina, Brasil e México (UNEP, 2016).

O Brasil apresenta centros urbanos, que possuem grande potencial em emitir gases precursores de *smog* fotoquímico, como a cidade de São Paulo/SP, Porto Alegre/RS, Rio de Janeiro/RJ, Curitiba/PR, etc. Alguns estados possuem um órgão ambiental responsável pelo monitoramento da qualidade do ar em regiões de interesse, como por exemplo, a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), a Fundação Estadual de Proteção Ambiental Henrique Luis Roessler (FEPAM) do estado do Rio Grande do Sul e o Instituto Ambiental do Paraná (IAP) do estado do Paraná.

Em relatório anual de qualidade do ar, a CETESB apresenta dados mostrando que o ozônio se encontra em maiores concentrações durante a primavera e o verão, devido à intensidade de radiação solar. A Região Metropolitana de São Paulo é uma das regiões que apresentam maior potencial de formação de ozônio, no Brasil, chegando a atingir a qualidade do ar “Péssima” em alguns dias, em função das emissões significativas de seus precursores, principalmente de origem veicular (CETESB, 2015), a CETESB utiliza os padrões de qualidade do ar estabelecidos pelo Decreto Estadual nº 59.113, de abril de 2013, presentes em Brasil (2013). A FEPAM (2015) apresenta em seu relatório anual, de monitoramento da qualidade do ar para a cidade de Porto Alegre/RS e região, um aumento na média geral das concentrações de ozônio troposférico nos últimos anos. Em alguns registros, estas concentrações encontravam-se acima da média estabelecida pela legislação - Resolução do CONAMA nº 03 de 28/06/1990,

que estabelece os padrões nacionais de qualidade do ar (BRASIL, 1990). A Tabela 1 apresenta os padrões de qualidade do ar devido a concentrações de O_3 na troposfera, estabelecidos pelas resoluções utilizadas pelos órgãos ambientais CETESB e FEPAM.

Tabela 1 - Padrões de qualidade do ar com relação à concentração de O_3 ($\mu g.m^{-3}$) no ar, do Decreto Estadual nº 59.113/13 e do CONAMA nº 03/90

Decreto Estadual nº 59.113/13 - CETESB	Qualidade do ar O_3 ($\mu g.m^{-3}$)	Resolução do CONAMA nº 03/90 - FEPAM	Qualidade do ar O_3 ($\mu g.m^{-3}$)
Boa	0 – 100	Boa	0 - 80
Moderada	>100 – 130	Regular	80-160
Ruim	>130 – 160	Inadequada	160-200
Muito Ruim	>160 – 200	Má	200-800
Péssima	>200	Péssima	>800

Fonte: Adaptado de Brasil (2013) e Brasil (1990).

Além dos órgãos ambientais, as instituições de ensino e pesquisa também desenvolvem pesquisas voltadas para a formação do *smog* fotoquímico, seus precursores e seus impactos na saúde da população e no meio ambiente. Como é o exemplo do estudo dos precursores de ozônio na cidade de São Paulo através de simulação computacional, elaborado por Orlando (2008). A pesquisa realizada por Cunha (2004), que estudou a influência da poluição do ar, em Curitiba, sobre o bioindicador *Nicotina tabacum L.*, planta sensível à poluição por ozônio, detectou o grau de contaminação por ozônio em diferentes locais da cidade. Outro estudo foi realizado por Souza (2013), que concluiu que há uma relação entre a concentração de ozônio e as variáveis meteorológicas, com as interações por doenças respiratórias na cidade de Campo Grande/MS.

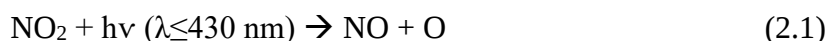
Apesar da exigência de órgãos ambientais pelo uso de tecnologias limpas, como, por exemplo, catalizadores em veículos, técnicas de tratamento de gases nas indústrias, dentre outras medidas para a redução da emissão de poluentes na atmosfera, observa-se que a formação de ozônio troposférico (*smog* fotoquímico) continua aumentando, segundo relatórios da CETESB (2015) e FEPAM (2015).

2.2.2 Processos químicos do *smog* fotoquímico

O *smog* fotoquímico ou ozônio fotoquímico, é um poluente secundário que surge como produto de uma sequência de diversas reações não-lineares na troposfera, entre radicais $\bullet OH$ (hidroxila), poluentes antropogênicos como NO_x , COVs e monóxido de carbono e, radiação ultravioleta (PREISS, 2015).

Os óxidos de nitrogênio gasosos (NO_x) são produzidos sempre que um combustível é queimado, em presença de ar com uma chama quente. Quando submetido a altas temperaturas, parte do nitrogênio e do oxigênio gasosos do ar combinam-se para formar óxido nítrico (NO), conforme a reação 2.1 (ORLANDO, 2008).

O NO_x desempenha um papel fundamental na formação de novos compostos na atmosfera, como o O_3 , aldeídos e compostos orgânicos nitrogenados. Um modelo resumido da ação dos NO_x é apresentado nas reações 2.1, 2.2 e 2.3 (ROCHA et al., 2009):



Os COVs são divididos em duas classes: uma de Compostos Orgânicos Voláteis Não Metano (COVNM), na qual se incluem os compostos orgânicos oxigenados, os halogenados e os hidrocarbonetos; e a outra classe na qual o metano faz parte. O metano é estudado separadamente, pois é o hidrocarboneto predominante na atmosfera, sua alta concentração é influenciada pelo seu longo tempo de vida (SEINFELD e PANDIS, 1998, apud ORLANDO, 2008).

Na ausência de COVs, estas reações levam a um equilíbrio entre NO, NO_2 e O_3 , que é dependente da intensidade da radiação solar, mas não é fortemente dependente da quantidade de NO_x , pois só depende de dois tipos de NO_x (NEVERS, 2000). Na presença de COVs, ocorre a formação de radicais intermediários $\text{HO}_2^\bullet$ e $\text{ROO}^\bullet$, que por sua vez, reagem com NO produzindo NO_2 (ATKINSON, 2000), de modo que não terão moléculas de NO suficiente para reagir com as moléculas de O_3 , o que leva ao acúmulo de O_3 no ar (NEVERS, 2000).

Outro poluente que contribui para a formação do ozônio troposférico é o CO, o qual é geralmente emitido na atmosfera como resultado da combustão incompleta de combustíveis fósseis ou de outros materiais que contenham carbono em sua composição (BRAGA et al., 2002). Na atmosfera, o CO é oxidado a CO_2 pelos radicais hidroxila, gerando radicais hidroperóxidos. Estes radicais hidroperóxidos, de maneira similar aos radicais peróxido formados pelos COVs, oxidam o NO a NO_2 sem destruir as moléculas de O_3 e, fazendo com que a concentração deste gás aumente na atmosfera (SEINFELD e PANDIS, 1998, apud ORLANDO, 2008).

O processo de formação do *smog* fotoquímico é altamente complexo, no qual ocorrem diversas reações envolvendo muitas moléculas. Segundo Baird e Cann (2011) e EC-JRC (2010) estas reações podem ser resumidas da seguinte forma:

1. Os COVs ou monóxido de carbono (CO) reagem com radical hidroxila $\bullet\text{OH}$ na troposfera e formam radicais de peróxidos ($\text{ROO}\bullet$);
2. Os radicais de peróxido oxidam NO em NO_2 ;
3. O NO_2 dissocia-se devido à luz solar ($\lambda \leq 430 \text{ nm}$), formando NO e liberando um átomo de oxigênio, sendo a principal fonte de oxigênio para a formação de ozônio;
4. Os átomos de oxigênio reagem com o oxigênio molecular O_2 , para formar o ozônio.

Este mecanismo pode ser descrito de forma resumida pelas reações 2.4, 2.5, 2.6 e 2.7, onde o R significa qualquer hidrocarboneto (NEVERS, 2000).



Portanto, são necessários ambos, COVs e NO_x , para a formação de *smog* fotoquímico. Para que estas reações ocorram, e formem os oxidantes fotoquímicos, a região precisa estar sob condições específicas como: radiação solar, estagnação do ar e emissão de grande quantidade de precursores (CETESB, 2015). Esta condição favorável geralmente ocorre durante um episódio de inversão térmica, dificultando o movimento ascendente dos gases e partículas.

2.2.3 Panorama da categoria de impacto *smog* fotoquímico na AICV

Preiss (2015) comenta que fluxos de NO_x e COVNM são emitidos ao longo do ciclo de vida de produtos e serviços, e nos últimos 20 anos, diversos métodos de AICV vêm sendo desenvolvidos para caracterizar esta e outras categorias de impacto, alguns fornecem FC em nível *midpoint* e/ou *endpoint* e, existem métodos genéricos e outros mais explícitos.

Estes métodos de AICV são compostos por modelos de caracterização que, no geral, abordam a não-linearidade na criação do ozônio, sobre condições específicas para a formação do fenômeno. Como também, pelo fato de que os impactos resultantes (danos à saúde humana,

aos seres vivos, à vegetação e aos materiais) dependem da exposição e/ou inalação do ozônio (PREISS, 2015).

Segundo Baumann e Tillmann (2004), a maioria dos modelos de caracterização foca nos impactos regionais, mas alguns também descrevem os impactos locais durante os episódios de pico. No geral, todos os modelos de caracterização calculam a quantidade estimada de ozônio fotoquímico formado pelas substâncias emitidas, mas de diferentes formas.

Para que o modelo de caracterização utilizado pelo método de AICV seja considerado eficaz, este precisa ser capaz de suportar a diferenciação espacial (por exemplo, um modelo que considere um continente em que existe uma grande diferença na densidade populacional em diferentes regiões) (EC-JRC, 2011). Além disso, outros fatores, como a reatividade de um composto, o tempo de reação, a emissão e a concentração de poluentes no ar, as condições meteorológicas, as estações do ano, são fatores importantes para a formação do *smog* fotoquímico, sendo assim, também precisam ser considerados (PREISS, 2015). Segundo o mesmo autor, os impactos modelados para o ozônio, devido às emissões antropogênicas, estão sujeitos a grande variabilidade e incertezas. Van Zelm (2010) comenta que estas incertezas fazem parte da modelagem porém, em nível *endpoint*, estas incertezas são maiores do que em nível *midpoint*.

Alguns dos FC em nível *endopint*, atualmente disponíveis na literatura para o impacto *smog* fotoquímico, podem ser atualizados à medida que o conhecimento do modelo de transporte químico é aprimorado e os dados epidemiológicos forem atualizados (VAN ZELM, 2010).

3 MATERIAL E MÉTODOS

Os materiais e métodos descritos neste capítulo foram divididos em 3 (três) etapas, sendo elas: seleção e descrição das características dos métodos de AICV e modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico; análise comparativa dos modelos de caracterização, onde se define a metodologia referente à busca por informações sobre os modelos de caracterização, como também a metodologia referente às tabelas dos critérios de comparação; e a terceira etapa, se refere à metodologia adotada para a elaboração do estudo de caso.

3.1 SELEÇÃO E DESCRIÇÃO DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO

Para a realização do estudo dos modelos de caracterização de AICV, foi adotado como procedimento inicial, uma revisão bibliográfica dos diferentes métodos de AICV que apresentam modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, bem como dos modelos de caracterização que não fazem parte de métodos de AICV.

Esta busca foi realizada por meio de documentos online, encontrados principalmente em bibliotecas virtuais: Google acadêmico, www.scopus.com, www.sciencedirect.com, portal CAPES, sites de métodos de AICV, etc. Os documentos pesquisados e estudados foram dissertações, teses, relatórios, artigos científicos, livros, manuais, sites, *softwares* de ACV, entre outras fontes relacionadas ao tema. As principais fontes de informações foram obtidas dos resultados da dissertação de Mendes (2013), dos métodos recomendados para a Europa presentes no *International Reference Life Cycle Data System (ILCD) Handbook* (EC-JRC, 2011), e por meio dos métodos presentes no *software* SimaPro[®], versão 8.3.0.0.

Com a revisão bibliográfica, foram encontrados 12 (doze) modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto *smog* fotoquímico. Sendo que, um destes não está presente em nenhum método de AICV. Além disso, foi encontrado um método de AICV (*Impact World+*) que faz uso de um modelo de caracterização para *smog* fotoquímico que não foi encontrado na literatura. Todos os modelos de caracterização estão presentes na Tabela 2, juntamente com o nível de avaliação do impacto (*midpoint* ou *endpoint*), a abrangência e o método de AICV que faz uso deste modelo, quando presente em algum método de AICV.

Tabela 2 - Modelos de caracterização de AICV para *smog* fotoquímico

Modelo de caracterização	Método de AICV	Nível de avaliação do impacto	Abrangência
Van Zelm et al. (2008; 2013)	ReCiPe 2008	E ^a	Europa
		E	
		M ^b	
Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999)	CML-IA <i>baseline</i>	M	Noroeste da Europa
Van Zelm et al. (2016)	ReCiPe 2016	E	Global - 56 regiões do mundo
		M	
		E	
		M	
Van Goethem et al. (2013)	- ^c	E	65 regiões da Europa
Krewitt et al. (2001)	EcoSense	E	15 regiões da Europa
		E	
Goedkoop e Spriensma (2001)	Impact 2002+ Eco-Indicator 99	M	Europa
		E	
Itsubo et al. (2008)	LIME	M	Japão
		E	
Carter (1998)	TRACI e LUCAS	M	América do Norte
RAINS model - Hauschild et al. (2006)	EDIP 2003	M	Europa
Steen (1999)	EPS 2000	E	Europa
Kemna et al. (2005)	MEEuP	M	Europa
- ^d	Impact World+	M	Global
		E	

Fonte: Elaborada pela autora (2018).

Notas: ^aE: *Endpoint*; ^bM: *Midpoint*; ^cModelo de caracterização que não faz parte de um método de AICV; ^dMétodo descrito no site <<http://www.impactworldplus.org/en/publications.php>>, porém não apresenta referência sobre o modelo de caracterização para *smog* fotoquímico.

Dos 12 (doze) modelos de caracterização encontrados, foram selecionados 5 (cinco) para análise. Logo, 6 (seis) não foram descritos nesta dissertação, pois apresentavam alguns fatores que dificultaram a sua descrição, deixando-os menos atrativos, quando comparados aos demais modelos de caracterização selecionados para a descrição, são eles:

- a) Goedkoop e Spriensma (2001): este modelo não foi incluído no estudo, devido ao difícil acesso aos materiais referente aos cálculos, aos modelos de transporte químico e aos dados que foram utilizados, dificultando assim o estudo;
- b) Itsubo et al. (2008): este modelo não foi incluído no estudo, devido ao difícil acesso às referências de base (documentos que apresentam os procedimentos utilizados que poderiam possibilitar sua análise e estudo), ou seja, as referências não foram encontradas com a mesma facilidade e clareza, em comparação aos métodos selecionados;

- c) Carter (1998): o modelo de caracterização elaborado por Carter (1998), o qual é utilizado pelo método de AICV - TRACI, apresenta diversos materiais/documentos facilmente encontrados em bibliotecas virtuais (Google acadêmico, www.scopus.com, www.sciencedirect.com, portal CAPES, sites de métodos de AICV, etc.). Estes documentos podem ser encontrados na forma de artigos científicos ou páginas da *internet* não publicadas em periódicos. Porém, muitos dos documentos de base, que poderiam conter informações úteis para o estudo e análise, não foram encontrados nas fontes de pesquisa e os documentos presentes na literatura não apresentam informações diretas para o estudo. Devido a esta falta de materiais de base e de excesso de documentos que apresentam somente atualizações do modelo, o mesmo não foi incluído no estudo;
- d) RAINS model - Hauschild et al. (2006): este modelo não foi incluído no estudo, devido à dificuldade em encontrar material na literatura referente aos cálculos, aos modelos de transporte químico, aos dados que foram utilizados, (referências de base), etc., quando comparado aos modelos selecionados para o estudo;
- e) Steen (1999): este modelo não foi incluído no estudo, devido à dificuldade em encontrar as referências de base para a pesquisa, quando comparado aos modelos selecionados para o estudo;
- f) Kemna et al. (2005): este modelo não foi incluído no estudo, devido à dificuldade em encontrar as referências de base para a pesquisa, quando comparado aos modelos selecionados para o estudo.

Após a seleção dos 5 (cinco) modelos de caracterização de AICV, cada um foi descrito individualmente, conforme informações encontradas na literatura, e introduzidos na cadeia de impacto presente no *ILCD Handbook* (EC-JRC, 2011). A cadeia de impacto e a descrição destes modelos são apresentados no item 4.1 desta dissertação.

3.2 ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO

Esta etapa foi dividida em duas seções, onde a primeira aborda as principais informações referentes aos modelos de caracterização estudados (pré-descrição) e a segunda apresenta os critérios de comparação para posterior análise dos modelos de caracterização que mais se adequam à realidade brasileira. Os resultados e a discussão desta etapa são apresentados no item 4.2 desta dissertação.

3.2.1 Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV

Após a descrição dos 5 (cinco) modelos de caracterização selecionados, foi possível diferenciá-los conforme suas principais características:

- Método(s) de AICV: que faz(em) uso do modelo de caracterização em destaque, quando presente em algum método de AICV;
- Nível de avaliação do impacto: que cada modelo apresenta resultados - *midpoint* e/ou *endpoint*;
- Impacto ambiental avaliado: dentro da cadeia de causa e efeito do *smog* fotoquímico, por exemplo, danos à saúde humana, danos aos ecossistemas, aumento da concentração de O₃ troposférico, etc.;
- Unidade de referência final: de cada FC calculado pelo modelo de caracterização e;
- Abrangência/escala: região para a qual o modelo calcula os FC. Quando o modelo apresenta FC para um país (nacional) é representado pelo nome do país, quando continental é representado pelo nome do continente, quando global é representado por Global e quando o modelo apresenta FC para diferentes regiões (países ou conjunto de países) é representado, também, pelo número de sub-regiões.

3.2.2 Critérios para análise comparativa

Para a comparação e avaliação da conformidade dos modelos de caracterização estudados, foram estabelecidos 3 (três) critérios principais e seus subcritérios. Esses critérios foram adaptados dos critérios gerais elaborados pela Rede de Pesquisa em AICV – Brasil, presentes em Ugaya et al. (2016), levando em consideração a descrição e análise dos 5 (cinco) modelos de caracterização selecionados para este estudo.

Para a avaliação da conformidade dos modelos de caracterização, o procedimento de pontuação utilizado por EC-JRC (2010, 2011) e Mendes (2013), foi adaptado. Assim, os três critérios principais (Escopo, Robustez Científica e FC nacional) foram classificados conforme os seguintes níveis de pontuação: Alto (3 pontos), Moderada/Alta (2,5 pontos), Moderado (2 pontos), Moderado/Baixo (1,5 pontos), Baixo (1 ponto) e, NA (não se aplica – 0 pontos) quando não possui informações suficientes para classificação. Os modelos foram avaliados subjetivamente da seguinte maneira:

- Alta: todos os subcritérios apresentam conformidade (3 pontos);

- Moderada/Alta: apenas um subcritério não apresenta conformidade (2,5 pontos);
- Moderada: alguns subcritérios não apresentam conformidade, no entanto, há conformidade nos critérios mais importantes, ou seja, apresenta ausência de informações (2 pontos);
- Moderada/Baixa: apenas um ou dois subcritérios apresentam conformidade (1,5 pontos);
- Baixa: todos os subcritérios não apresentam conformidade, ou seja, o modelo apresenta ausência de informações essenciais (1 ponto);
- NA (Não se Aplica): quando o modelo não apresenta informações referentes ao critério, ou quando o modelo não se aplica ao critério (0 pontos).

A pontuação não segue uma escala padrão, mas depende de uma avaliação qualitativa ampla, considerando o valor obtido para cada subcritério, como também os aspectos gerais do modelo (grau de precisão do modelo de dispersão utilizado, grau de detalhamento do critério, etc.). A pontuação foi brevemente explicada no espaço para observações da tabela de critérios, e posteriormente detalhada em uma comparação entre os modelos de caracterização no texto.

A descrição e o objetivo dos 3 (três) critérios principais (Escopo, Robustez Científica e FC nacional) e seus respectivos subcritérios foram:

CRITÉRIO 1 - ESCOPO: este critério foi avaliado de forma subjetiva, levando em consideração a qualidade do escopo de cada modelo de caracterização, de acordo com os subcritérios:

1.1. Abrangência do escopo de aplicação: a classificação deste item foi realizada conforme a abrangência/escala do modelo: global, continental, nacional, regional (quando engloba um conjunto de países menores ou um conjunto de estados de um país) ou local (para regiões menores).

1.1.1. Nível de diferenciação espacial (*grid-cell*¹): indicar a resolução (km x km) considerada no modelo de transporte de poluentes.

1.1.1.1. Resolução espacial representa formação e dispersão do *smog* fotoquímico: indicar se a diferenciação espacial do item 1.1.1 representa a qualidade da escala utilizada. Caso a resolução for

¹ *Grid-cells* são pontos de grande, ou seja, a resolução em que o modelo realiza os cálculos.

muito baixa, o modelo de transporte químico pode não representar de forma adequada a formação do *smog* fotoquímico, apresentando FC superestimados ou subestimados. A resolução foi classificada como alta, moderada ou baixa.

1.1.2. Fluxos elementares considerados: apresentar a quantidade de fluxos elementares considerados pelo modelo e quais são considerados de maior importância/valor na formação de *smog* fotoquímico, quando presentes. É importante que o modelo considere no mínimo NO_x e COVNM, na formação do fenômeno. Este item foi dividido em duas etapas: a) Nível de fluxos elementares na fonte (artigo); b) Nível de fluxos elementares no *software*. Esta divisão foi necessária, pois observou-se que o número de fluxos elementares presente na fonte (artigo científico do modelo) apresentava uma certa quantidade de fluxos elementares, e o qual é ampliado para uso no *software*.

1.2. Em que parte do mecanismo ambiental está o modelo: indicar o nível de avaliação do impacto considerado pelo modelo (*midpoint* (M) e/ou *endpoint* (E)).

CRITÉRIO 2 - ROBUSTEZ CIENTÍFICA: este critério foi avaliado levando em consideração a transparência e clareza dos dados, com o objetivo de facilitar a indicação do modelo que apresenta melhores condições de ser reproduzido. Para esta classificação, foram utilizados os seguintes subcritérios.

2.1. Faz parte de algum método de AICV ou é reconhecido pela comunidade científica?

Sim: quando o modelo é reconhecido pela comunidade científica e/ou faz parte de algum método de AICV (apresentou-se, nas observações, o método de AICV que faz uso do modelo de caracterização, caso contrário deixou-se em branco).

Não: quando o modelo não é reconhecido pela comunidade científica e não faz parte de algum método de AICV.

2.2. Transparência e acessibilidade: indicar se a descrição das equações do modelo de transporte químico e dos dados secundários utilizados pelo modelo de caracterização é adequada. A classificação foi feita entre alta, moderada ou baixa, conforme estudos encontrados na literatura.

2.2.1. Clareza das equações do modelo de caracterização:

Sim: quando o modelo descreve, com clareza, como as equações foram obtidas e onde os dados foram encontrados.

Não: quando o modelo não apresenta de forma clara as equações utilizadas durante o cálculo do FC.

2.2.2. Clareza das variáveis:

Sim: quando o modelo descreve como as variáveis utilizadas nos cálculos do FC foram obtidas e os valores estão disponíveis na literatura.

Não: quando o modelo não apresenta de forma clara, como as variáveis utilizadas nos cálculos foram obtidas.

2.2.3. Modelo matemático de transporte:

Sim: apresenta o modelo de transporte químico utilizado, sendo que sua descrição está disponível na literatura.

Não: não apresenta informações sobre o modelo de transporte químico utilizado e não existem informações disponíveis na literatura.

2.2.4. Representa as reações não-lineares da formação do *smog* fotoquímico:

Sim: o modelo matemático de transporte químico utilizado descreve as reações de formação do *smog* fotoquímico.

Não: o modelo matemático de transporte químico não descreve as reações de formação de *smog* fotoquímico.

CRITÉRIO 3 - FC NACIONAL: este critério tem como objetivo diferenciar os modelos de caracterização que apresentam FC para o Brasil, analisando se este FC é adequado para a realidade brasileira. Quando o modelo de caracterização não apresenta um FC para o Brasil, é classificado como NA (Não se aplica).

3.1. Possui FC para o Brasil: indicar se o modelo apresenta um FC específico para o Brasil (sim ou não).

3.1.1. Diferenciação espacial: indicar resolução (km x km) utilizada nos cálculos do FC do Brasil.

3.1.2. FC apropriado para o contexto nacional:

Sim: o modelo consegue representar a formação de *smog* fotoquímico no Brasil, pois, faz uso de dados secundários próprios do Brasil e considera

as diferenças climáticas, geográficas e as variações de emissões entre os estados/regiões.

Não: possui um FC para o Brasil, porém não leva em consideração a diferença climática, geográfica e as variações de emissões em diferentes regiões.

Sintetizando este procedimento, a Tabela 3 apresenta os critérios e subcritérios de comparação e seleção dos modelos de caracterização descritos.

Tabela 3 - Critérios para comparação e seleção dos modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico para a realidade brasileira

Critérios		Níveis de classificação				Observações
		Modelo de Caracterização				
Critério 1 - Escopo		Alta	Moderada	Baixa	NA	
1.1	Abrangência do escopo de aplicação	Global/ Continental/ Regional				
1.1.1	Nível de diferenciação espacial	km x km - ° x °				
1.1.1.1	Resolução espacial representa formação e dispersão do <i>smog</i>	Alta	Moderada	Baixa		
1.1.2ª	Nível de fluxos elementares na fonte (artigo)	Número de fluxos				
1.1.2b	Nível de fluxos elementares no <i>software</i>	Número de fluxos				
1.2.	Mecanismo ambiental do modelo	M/E				
Critério 2 - Robustez Científica		Alta	Moderada	Baixa	NA	
2.1	Faz parte de um método de AICV e é reconhecido pela comunidade científica?	Sim		Não		
2.2	Transparência e acessibilidade	Alta	Moderada	Baixa		
2.2.1	Clareza das equações	Sim		Não		
2.2.2	Clareza das variáveis	Sim		Não		
2.2.3	Modelo matemático de transporte	Sim		Não		
2.2.4	Representa as reações não-lineares da formação do <i>smog</i> fotoquímico	Sim		Não		
Critério 3 - FC nacional		Alta	Moderada	Baixa	NA	
3.1	Possui FC para o Brasil	Sim		Não		
3.1.1	Diferenciação espacial	km x km - ° x °				
3.1.2	FC apropriado para o contexto nacional	Sim		Não		

Fonte: Adaptada de Ugaya et al. (2016).

3.3 ESTUDO DE CASO: COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO *SMOG* FOTOQUÍMICO: uma avaliação no transporte de açúcar no Brasil

O estudo de caso teve como objetivo a comparação e análise dos modelos de caracterização de AICV, para a categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico, selecionados e descritos neste estudo. Para dar suporte à comparação e análise, os modelos foram aplicados em um estudo de caso, onde foi avaliado o potencial de formação de *smog* do transporte de 1 (uma) tonelada de açúcar considerando, dois trajetos (um rodoviário e um ferroviário), que partem do centro de Campinas/SP, com o Porto de Santos como destino final.

3.3.1 Seleção e avaliação dos modelos de caracterização

Os métodos de AICV, compostos por modelos de caracterização, auxiliam na interpretação dos efeitos ambientais (SANTOS, 2006), otimizam e facilitam estudos de ACV. Para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, existem modelos de caracterização que consideram FC específicos, desenvolvidos por especialistas de diferentes regiões do mundo.

Os modelos aplicados no estudo de caso foram: Van Zelm et al. (2016) apresenta FC em nível *endpoint* e *midpoint*; Van Zelm et al. (2008; 2013), fornece resultados em nível *midpoint* e *endpoint*; Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999), fornece resultados em nível *midpoint*; Van Goethem et al. (2013a), apresenta FC em nível *endpoint*; Krewitt et al. (2001) fornece FC em nível *endpoint*.

Os modelos de Krewitt et al. (2001), Van Goethem et al. (2013a) e Van Zelm et al. (2016)² não estão presentes no *software SimaPro*® versão 8.3.0.0. (PRé Consultants, 2016). Logo, as categorias de impacto referentes a formação de *smog* fotoquímico, destes modelos, foram incluídas na base de dados do programa, conforme informações obtidas nas respectivas bibliografias (KREWITT et al., 2001; VAN GOETHEM et al., 2013a; HUIJBREGTS et al., 2016; 2017; VAN ZELM et al., 2016).

Com o objetivo de facilitar a avaliação e a comparação entre os modelos de caracterização, foram detalhados: a região de referência: continente, país, região específica; a

² O modelo de Van Zelm et al. (2016) – Global, está presente na versão atualizada do *software SimaPro*® versão 8.5.0.0. (PRé Consultants, 2017), atualizado em fevereiro de 2018.

categoria de impacto (nível de avaliação) dos modelos; a porcentagem relativa dos trajetos e; a unidade de referência final.

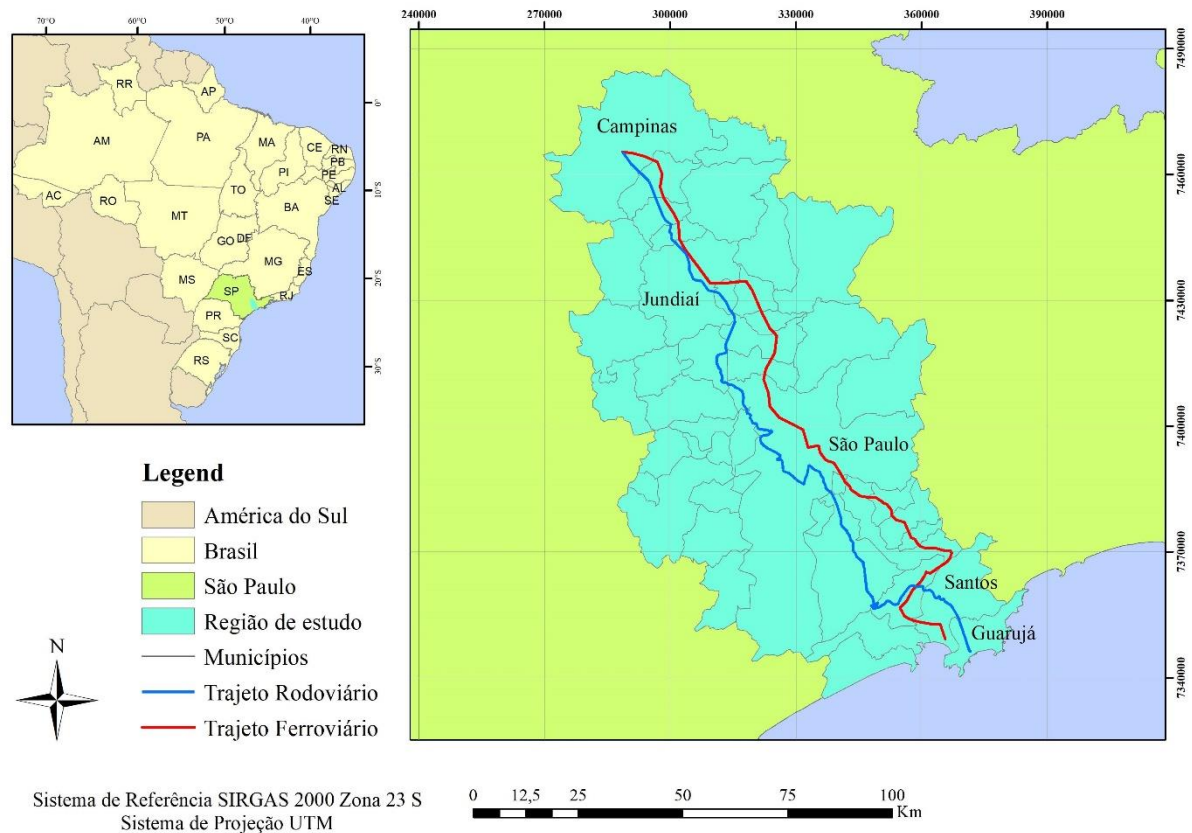
Os modelos de caracterização não são comparáveis segundo seus resultados, pois apresentam unidades de referência final diferentes. Assim, para viabilizar a comparação, uma porcentagem relativa foi aplicada nos resultados de cada modelo, onde o trajeto com maior capacidade de impacto recebeu 100% do poder de impacto e o trajeto com menor capacidade recebeu uma porcentagem relativa a este impacto (procedimento conhecido por normalização interna dos resultados).

3.3.2 Seleção do trajeto e base de dados

O trajeto ferroviário analisado foi a simulação de um trem saindo do terminal ferroviário de Campinas/SP, no centro da cidade, passando pelo centro das cidades de Jundiaí/SP e de São Paulo/SP, com destino final no Porto de Santos na cidade de Santos/SP. Este trajeto apresentou 186 km de ferrovia (Figura 4 - trajeto em vermelho).

O trajeto rodoviário analisado foi a simulação de um caminhão saindo do centro da cidade de Campinas/SP (mesmo endereço do terminal ferroviário), passando pela Rodovia Anhanguera (SP-330), pelo centro de Jundiaí/SP e de São Paulo/SP, prosseguiu pela Rodovia Piaçaguera-Guarujá até o Porto de Santos, na cidade de Guarujá/SP. Este trajeto apresentou 190 km (Figura 4 – trajeto em azul).

Figura 4 - Mapa dos trajetos de Campinas/SP até o Porto de Santos



Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Para a análise dos modelos de AICV e dos diferentes trajetos, foi utilizado o *software SimaPro*[®] versão 8.3.0.0. (PRé Consultants, 2016). Devido à falta de uma base de dados brasileira, as informações para modelar os tipos de transporte foram extraídas da base de dados *ecoinvent 3 – allocation, recycled content - unit*, presente no *software* e que representa os tipos de transportes na Europa. Assim, para o transporte ferroviário foi utilizado a base de dados de um trem movido a diesel, com filtro para partículas. Para o transporte rodoviário, foi utilizado um caminhão movido à diesel, com capacidade de carga superior à 32 toneladas, cuja sintaxe está presente na Tabela 4.

Tabela 4 - Base de dados dos transportes utilizados

Transporte	Processos da base de dados do <i>ecoinvent</i>	Modelagem
Rodovia	<i>Transport, freight, lorry >32 metric ton, EURO3 {RoW} transport, freight, lorry >32 metric ton, EURO3</i>	<i>Alloc Rec, U</i>
Ferrovia	<i>Transport, freight train {RoW} diesel, with particle filter</i>	

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

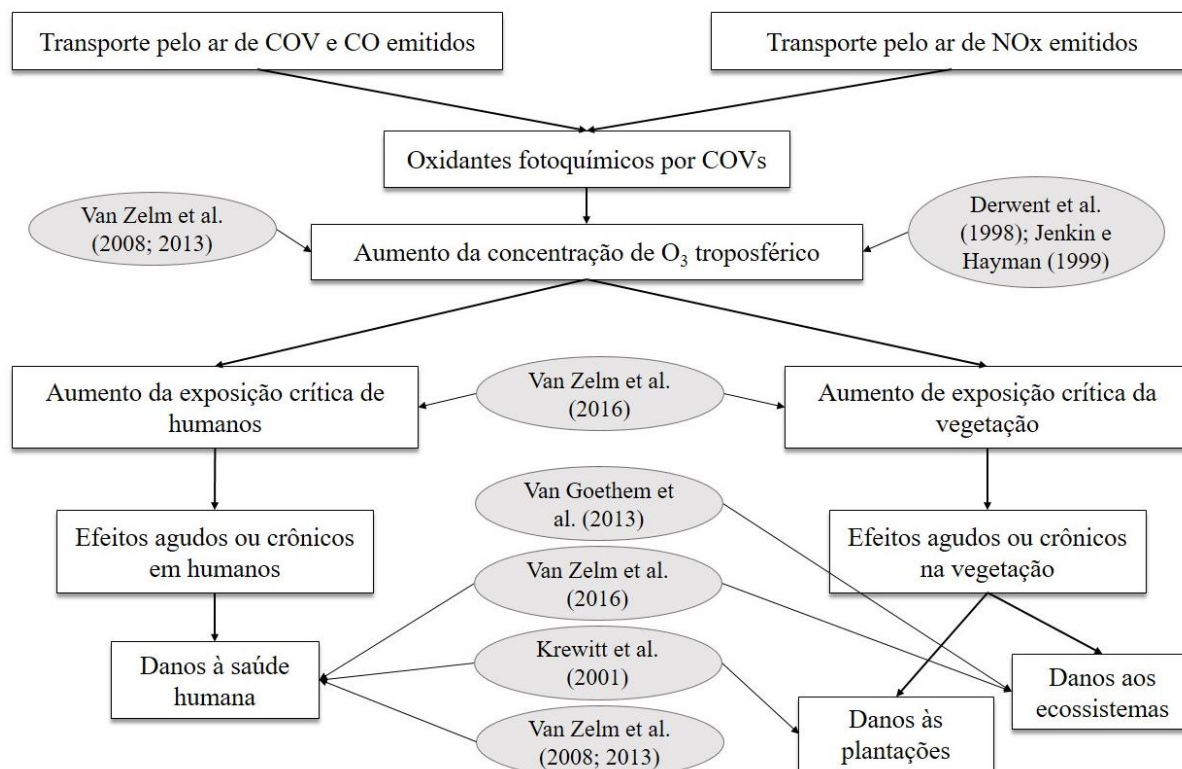
Esta sessão apresenta os resultados e discussões da dissertação, a qual foi dividida em 3 (três) subitens. O item 4.1 apresenta a seleção e descrição dos modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico. Já o item 4.2 apresenta a análise comparativa dos modelos de caracterização para a categoria *smog* fotoquímico, por meio dos critérios referentes aos FC fornecidos pelos métodos e apresenta resultados da tabela de critérios. Por fim, as considerações finais e recomendações acerca dos cinco modelos de caracterização estudados são apresentadas no item 4.3.

4.1 SELEÇÃO E DESCRIÇÃO DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO

4.1.1 Modelagem de AICV para *smog* fotoquímico

Dos 11 (onze) modelos de caracterização de AICV para a categoria de impacto formação de *smog* fotoquímico, encontrados na literatura, foram selecionados 5 (cinco) para a descrição, comparação e análise para futuros estudos de regionalização.

A Figura 5 apresenta, a cadeia de impacto (ou cadeia de causa-efeito) da formação do *smog* fotoquímico e os níveis de impacto de cada modelo de caracterização selecionado e abordado por este estudo. Observa-se que os impactos em nível *endpoint* são os danos de final de cadeia, ou seja, danos à saúde humana, danos às plantações e danos aos ecossistemas. Já os danos em nível *midpoint* são todos os impactos que antecedem estes, desde transporte pelo ar de COV, CO e NO_x até efeitos agudos ou crônicos em humanos e na vegetação.

Figura 5 - Cadeia de impacto da formação de *smog* fotoquímico

Fonte: Adaptada de EC-JRC (2011).

Conforme observa-se no fluxograma (Figura 5), 3 (três) modelos apresentam resultados em nível *midpoint*: (1) O modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013), utilizado pelo método de AICV ReCiPe 2008, apresenta o cálculo do Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos (PFO) que representa a concentração de ozônio fotoquímico; (2) o modelo descrito por Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999), apresenta o Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímicos (PCOFs); e (3) o modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta o PFOH (Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Humanos) e o PFOE (Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Ecossistemas), os quais levam em consideração a inalação do poluente pela população e a exposição da vegetação ao poluente (oxidantes fotoquímicos).

Com relação aos FC *endpoint*, 3 (três) modelos apresentam FC para danos à saúde humana (KREWITT et al., 2001, VAN ZELM et al., 2008 e VAN ZELM et al., 2016). Para outros efeitos ambientais, 2 (dois) modelos apresentam FC *endpoint* para danos aos ecossistemas (VAN GOETHEM et al., 2013a,b e VAN ZELM et al., 2016) e 1 (um) apresenta FC *endpoint* para danos às plantações (KREWITT et al., 2001).

4.1.2 Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2008; 2013) – ReCiPe 2008

O modelo de Van Zelm et al. (2008) apresenta FC para as categorias de impacto danos à saúde humana (morbidade e mortalidade), causados pela exposição ao material particulado com diâmetro aerodinâmico menor ou igual a $10\mu\text{m}$ (MP_{10}) antropogênico e ao ozônio troposférico. Estes impactos ambientais são formados pelas reações dos poluentes amônia (NH_3), dióxido de enxofre (SO_2), MP_{10} , NO_x , COVNM, como também para COVNM individuais.

O FC *endpoint* (danos à saúde humana devido à mortalidade) é calculado em termos de uma mudança marginal em DALY³ (Anos de Vida Ajustados por Incapacidade) de habitantes europeus, devido à mudança marginal nas emissões de NO_x e COVNM (VAN ZELM et al., 2008). DALY representa os anos de vida perdidos ou desabilitados devido a doenças causadas pela emissão de substâncias durante o ciclo de vida de um produto (GOEDKOOPE et al., 2013).

Este modelo de caracterização é utilizado pelo método ReCiPe versão 2008, método Holandês que oferece resultados tanto em nível *midpoint* quanto em *endpoint*. Em outras palavras apresenta os impactos gerados pelos gases que estão num estágio intermediário (por exemplo, *smog* fotoquímico devido a emissão de gases), e os impactos finais à saúde humana, aos ecossistemas e à depleção de recursos naturais, para todas as categorias de impacto. Logo, este método permite uma abordagem de ACV mais flexível e uniforme (VAN ZELM et al., 2013).

O método ReCiPe 2008 apresenta cálculos do FC para COVNM, NO_x e para 135 COVNM individuais baseados no do Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímico (PCOF) para COVNM individuais em nível *endpoint*. Como também, cálculos para o Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos (PFO) em nível *midpoint*.

4.1.2.1 Fator de Caracterização *endpoint* - danos à saúde humana

A equação (3) expressa o cálculo dos $\text{FC}_{\text{endpoint},x}$ (ano.kg^{-1}) para danos à saúde humana devido à emissão do poluente x na Europa:

³ DALY: *Disability Adjusted Life Years* - Anos de Vida Ajustados por Incapacidade: unidade de medida mundial, um DALY pode ser interpretado como um ano de vida "saúdável" perdido. A soma destes DALY em toda a população, ou o fardo da doença, pode ser interpretado como uma medida entre o estado atual da saúde e uma situação de saúde ideal, onde toda a população vive até uma idade avançada, livre de doenças e deficiências (WHO, 2017).

$$FC_{endpoint,x} = \sum_i (FI_{pop,x,i} \times \sum_e (FE_{e,k,i} \times FDa_{e,k})) \quad (3)$$

Este $FC_{endpoint,x}$ é composto por um de Fator de Inalação ($FI_{pop,x,i}$) do poluente emitido x pela população pop , e pela combinação dos Fatores de Efeito ($FE_{e,k,i}$ em kg^{-1}) e Dano ($FDa_{e,k}$ em ano), de uma doença e causada pelo poluente formado k em uma *grid* i . Os resultados do $FC_{endpoint}$ total da Europa, para mortalidade devido à formação de O_3 , estão presentes na Tabela 5. Os dados são para 1% do aumento das emissões, para as concentrações médias diárias de 8h e 24h (VAN ZELM et al., 2008).

Tabela 5 - FC endpoint para danos à saúde humana causados por mortalidade aguda

Poluente	Substâncias emitidas	Fator de caracterização (DALY.kg ⁻¹ de emissão - ano.kg ⁻¹)
O ₃ (8h)	NO _x	3,9x10 ⁻⁸
	COVNM	3,9x10 ⁻⁸
O ₃ (24h)	NO _x	-1,2x10 ^{-7 a}
	COVNM	3,9x10 ⁻⁸

Fonte: Adaptada de Van Zelm et al. (2008) e relatório ReCiPe 2008 (GOEDKOOPE et al., 2013).

Notas: ^a No *software* usa-se o valor de 8h, provavelmente porque o FC referente à 24h apresenta-se negativo.

Os FC para NO_x e COVNM foram comparados com aumentos de emissões de 1%, 5% e 10%, demonstrando que dificilmente ocorre mudança nos valores finais. Contudo, não se sabe o que ocorre para maiores aumentos de emissões, segundo Van Zelm et al. (2008).

Os FC para COVNM para ambos os tempos de concentração médias diárias são iguais. Enquanto o FC para NO_x para a concentração média diária de 8h é positivo e para a concentração média diária de 24h é negativo. Isso se deve ao efeito de titulação do NO_x próximo às fontes de emissões (VAN ZELM et al., 2008), porém, não se deve interpretar FC negativos de forma a dizer que emitir mais poluente é benéfico ao meio ambiente (KREWITT et al., 2001).

Fator de Inalação (FI)

O $FI_{pop,x,i}$ da população devido a emissão de uma substância x , é definido como o aumento marginal na taxa de inalação do poluente k pela população pop , por *grid-cell* i ($dI_{pop,k,i}$); induzido por um aumento marginal na emissão da substância x (dM_x), expressa pela equação (4):

$$FI_{pop,x,i} = \frac{dI_{pop,k,i}}{dM_x} = (IH \times N_i) \frac{dC_{k,i}}{dM_x} \quad (4)$$

onde: $dI_{pop,k,i}$ é o aumento marginal na taxa de inalação do poluente k pela população pop , por *grid-cell* i ; dM_x é o aumento marginal na emissão da substância x ; IH é a taxa de respiração média da população ($13\text{m}^3.\text{dia}^{-1} = 4.745\text{m}^3.\text{ano}^{-1}$; U.S. EPA, 1997); N_i é o número de habitantes na *grid-cell* i ; e $dC_{k,i}$ é a concentração média anual do poluente k na *grid-cell* i (kg/m^3).

A química e a formação não linear do ozônio é relativamente complexa, portanto, o modelo dinâmico LOTOS-EUROS, utilizado por Schaap et al. (2008), foi aplicado para calcular o FI de ozônio devido às emissões de NO_x e COVNM (VAN ZELM et al., 2008; GOEDKOOP et al., 2013).

Modelo dinâmico LOTOS-EUROS: O modelo é utilizado para calcular a dispersão e as transformações químicas dos poluentes no ar na baixa troposfera sobre a Europa. Ele é um modelo dinâmico, não linear, capaz de capturar muito bem a variabilidade da formação do ozônio, especialmente no verão. Sendo apropriado para simular a concentração do ozônio tanto nos centros urbanos, como nas áreas rurais localizadas próximas aos centros urbanos (VAN ZELM et al., 2008). O modelo apresenta equações que descrevem a mudança no tempo da concentração de um componente, como um resultado dos processos de transporte e difusão, da química, da deposição seca e úmida, e das emissões. O domínio principal do LOTOS-EUROS está limitado à 35° e 70° Norte e 10° Oeste e 60° Leste, a projeção normal é longitude-latitude e a resolução da grade padrão é $0,50^\circ$ longitude X $0,25^\circ$ latitude, que trata de 14.000 *grid-cells* de aproximadamente $0,25^\circ \times 0,25^\circ$. O modelo se estende em uma direção vertical de 3,5 km acima do nível do mar, seguindo a dinâmica da mistura das camadas (SCHAAP et al., 2008). Dados meteorológicos de 1997 foram usados, pois este ano representa uma condição média da formação do ozônio (TARRASÓN et al., 2005, apud VAN ZELM et al., 2008). Incrementos de emissões de 1%, 5% e 10% do ano de referência 2000 foram utilizados para verificar se há desvio na linearidade do FI de ozônio para esta faixa de mudança de emissões, e demonstrando que dificilmente ocorre mudanças nos valores finais do FI, segundo Schaap et al. (2008).

Os resultados do $FI_{pop,x,i}$ total da Europa, para mortalidade devido à formação de O_3 , estão presentes na Tabela 6. Os dados são para 1% do aumento das emissões, para as concentrações médias diárias de 8h e 24h (VAN ZELM et al., 2008).

Tabela 6 - FI para danos à saúde humana

Poluente	Substâncias emitidas	Fator de Inalação
O ₃ (8h)	NO _x	1,2x10 ⁻⁷
	COVNM	1,2x10 ⁻⁷
O ₃ (24h)	NO _x	-7,9x10 ⁻⁷
	COVNM	2,6x10 ⁻⁷

Fonte: Adaptada de Van Zelm et al. (2008) e relatório ReCiPe 2008 (GOEDKOOPE et al., 2013).

Os FI para NO_x e COVNM foram comparados com aumentos de emissões de 1%, 5% e 10%, demonstrando que dificilmente ocorre mudança nos valores de FI. Contudo, não se sabe o que ocorre para maiores aumentos de emissões, segundo Van Zelm et al. (2008).

Para 8h de concentração diária, os FI são iguais para ambos os precursores. Enquanto, para 24h de concentração diária, o FI devido ao NO_x é negativo, e para o COVNM o FI apresentou-se 2 vezes maior do que para 8h de concentração, isso se deve ao maior tempo de exposição (24h) (VAN ZELM et al., 2008). O valor negativo de NO_x, ocorre devido ao resultado da rápida reação do ozônio (efeito de titulação) com o NO para formar NO₂ próximo das fontes de emissão, e à diferença de radiação, que também interfere na formação diária de ozônio. Por exemplo, Van Zelm et al. (2008) obteve FC Europeu negativo, pois utilizou a concentração média de ozônio de 24h diárias (-1,2x10⁻¹ ano.kton⁻¹), e um FC positivo (3,9x10⁻² ano.kton⁻¹) usando uma concentração média de ozônio de 8h diárias. Enquanto Van Zelm et al. (2016) obteve um FC positivo (3,1x10⁻¹ ano.kton⁻¹), utilizando a "máxima média móvel ao longo de seis meses da maior concentração diária de ozônio de 1 hora" como unidade de medida da mudança de concentração (M6M em µg.m⁻³).

Logo, o uso de diferentes padrões de medida (8h diárias, 24h diárias, M6M, etc.), bem como a época do ano considerada pelo modelo (devido à quantidade de radiação solar do dia), podem proporcionar resultados diferentes para uma mesma região.

Fator de Efeito (FE) e Fator de Dano (FDa)

O FE e o FDa representam uma relação resposta à exposição ao poluente (oxidantes fotoquímicos). O cálculo do FE_{e,k,i} e o FDa_{e,k,i} combinados, causados por uma doença *e*, devido o poluente *k* em uma *grid-cell* *i*, são definidos pela equação (5) a qual foi descrita em Van Zelm et al. (2008):

$$FE_{e,k,i} \cdot FDa_{e,k,i} = \sum_e \left(\frac{\partial AB_{e,k,i}}{\partial I_{pop,k,i}} \times \frac{\partial DALY_{e,k,i}}{\partial AB_{e,k,i}} \right) \quad (5)$$

onde: o $FE_{e,k,i}$ (kg^{-1}) liga as mudanças marginais da taxa de inalação ($dI_{\text{pop},k,i}$) com as mudanças marginais da carga/fardo atribuível ($dAB_{e,k}$) de uma população *pop* em contrair uma doença *e*, devido à exposição ao poluente *k*, por um ano de exposição (ano^{-1}) na *grid i*. O $FDa_{e,k,i}$ (ano), liga as mudanças marginais na carga/fardo atribuível ($dAB_{e,k}$) com mudanças marginais no DALY, devido uma doença *e*, causada por um poluente *k* em uma *grid i*.

O FE de uma doença *e* devido um poluente *k*, somente é calculado para *grid-cells i* Europeias com densidade de população acima de zero. O cálculo é definido pela equação (6):

$$FE_{e,k,i} = \frac{dAB_{e,k,i}}{dI_{k,i}} = \frac{dAB_{e,k,i}}{IH \times dC_{k,i}} = \frac{(RR_{e,k} - 1) \times F_{\text{inc},e}}{IH \times ((RR_{e,k} - 1) \times C_{k,i} + 1)^2} \quad (6)$$

onde: $RR_{e,k}$ é o risco relativo de obter uma doença *e* devido à exposição a um poluente *k* (por $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$), o $RR_{e,k}$ para mortalidade aguda devido a exposição ao ozônio na concentração média de 8h foi obtido de Anderson et al. (2004), e de Bell et al. (2005) para a concentração média de 24h; $F_{\text{inc},e}$ é a taxa de incidência de uma doença *e* por ano de exposição (ano^{-1}); $C_{k,i}$ é a concentração média anual do poluente *k* em uma *grid-cell i* ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$); IH é a taxa de respiração média humana ($4.745 \text{ m}^3 \cdot \text{ano}^{-1}$; U.S. EPA, 1997).

O $FDa_{e,k}$ de uma doença *e*, devido ao poluente *k*, é definido pela equação (7):

$$FDa_{e,k} = \frac{dDALY_{e,k,i}}{dAB_{e,k,i}} = YLL_e + D_e \times S_e \quad (7)$$

onde: YLL_e (*Years of Life Lost*) são os anos de vida perdidos devido à doença *e* (ano^{-1}); D_e é a duração dos efeitos na saúde *e* (ano) e; S_e é a severidade dos efeitos na saúde *e* (adimensional). Ambos, D_e e S_e , são dados relacionados às internações hospitalares (VAN ZELM et al., 2008).

Com exceção da concentração C_k , que foi calculada pelo modelo LOTOS-EUROS, os demais parâmetros são obtidos por meio de dados secundários, consultados em artigos científicos, instituições, organizações na área da saúde (como por exemplo a Organização Mundial da Saúde), dentre outros (VAN ZELM et al., 2008). Os dados de entrada para os efeitos na saúde e o resultado do cálculo do FE e FDa, atribuíveis à exposição ao ozônio e presentes em Van Zelm et al. (2008), são apresentados na Tabela 7.

Tabela 7 - Dados de entrada para os cálculos dos FE e FDa e os seus resultados médios (combinados) da Europa atribuíveis as concentrações de O₃

Poluente	Doença	RR _{e,k} (μg.m ⁻³)	F _{inc,e} (ano ⁻¹)	YLL _e (ano ⁻¹)	FE e FD (ano.kg ⁻¹)
O ₃ 8h	Mortalidade aguda	1,0003 ^a	6,76x10 ^{-3b}	0,25 ^c	0,3 (8h)
O ₃ 24h		1,000435 ^d			0,2 (24h)

Fonte: Adaptada de Van Zelm et al. (2008).

Notas: ^aAnderson et al. (2004); ^bEurostat (2007); ^cKnol e Staatsen (2005); ^dBell et al. (2005).

4.1.2.2 Fator de Caracterização - para COVNM individuais

Segundo Van Zelm et al. (2013), o FC para COVNM não diferencia a formação de ozônio por hidrocarbonetos individuais, no entanto, a reatividade entre hidrocarbonetos isolados varia muito. Para avaliar a contribuição das substâncias individuais para a formação de ozônio, Van Zelm et al. (2008) introduziu o conceito de Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímico (PCOF) de Derwent e Jenkin (1991).

Os PCOF são reações relativas, calculadas para a formação de ozônio em um volume de ar, com etileno como substância de referência. O PCOF de um COV é a razão entre a mudança na concentração de ozônio devido à mudança na emissão de um COV *x*, e a mudança na concentração de ozônio devido a uma mudança relativa igual na emissão de etileno (DERWENT et al., 1998). Para acoplar o FC total de COVNM para classes individuais de COVNM, os PCOFs de Derwent et al. (1998) foram usados. A equação (8) foi utilizada para calcular o FC para um hidrocarboneto específico (VAN ZELM et al., 2013):

$$FC_x = \frac{PCOF_x}{PCOF_{COVNM}} \times FC_{COVNM} \quad (8)$$

onde: FC_{*x*} é o fator de caracterização de uma substância *x*; PCOF_{*x*} é o potencial de criação de oxidantes fotoquímico de uma substância *x*; PCOF_{COVNM} é o potencial de criação de oxidantes fotoquímico do COVNM; FC_{COVNM} é o fator de caracterização do COVNM.

Com estes cálculos foi possível obter os FC *endpoint* e *midpoint* para os 135 COVNM e NO_x presentes no método de AICV ReCiPe 2008, baseados nos valores de PCOFs encontrados em Derwent et al. (1998). Assim, o método ReCiPe apresenta FC *endpoint* para 137 substâncias.

4.1.2.3 Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2013) – ReCiPe 2008

Van Zelm et al. (2013) apresenta um FC *midpoint* para as categorias de impacto Potencial de Formação de Material Particulado (PFMP) e o Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos (PFO). Estas categorias são definidas no local onde os mecanismos de uma substância começam a reagir, refletindo as questões de relevância ambiental. Os indicadores de categoria são: a quantidade de inalação de material particulado (kg de MP₁₀) e a concentração de ozônio fotoquímico (kg de COVNM no ar), representando o que causa o impacto (VAN ZELM et al., 2013). Neste trabalho, somente o PFO foi abordado.

Fator de Caracterização *midpoint*

De acordo com Van Zelm et al. (2013), o FC para o PFO de uma substância *x* deve ser representativo para ambos os potenciais, de efeito ao ecossistema e efeitos à saúde humana. Então, o PFO é definido pela equação (9) (VAN ZELM et al., 2013):

$$PFO = \frac{\overline{dC_{O_3} / dM_x}}{dC_{O_3} / dM_{COVNM}} \quad (9)$$

O PFO é definido como a mudança marginal em 24h da média da concentração de ozônio na Europa (dC_{O_3} em $kg.m^{-3}$), devido a uma mudança marginal na emissão da substância *x* (dM_x em $kg.ano^{-1}$), dividido pela mudança marginal em 24h da média da concentração de ozônio na Europa (dC_{O_3} em $kg.m^{-3}$), devido a uma mudança marginal na emissão de COVNM (dM_{COVNM} em $kg.ano^{-1}$), expresso em COVNM-equivalente.

Segundo Goedkoop et al. (2013), a concentração média de ozônio na Europa muda conforme a região, logo a concentração de ozônio é calculada pela média das concentrações de *grid-cells* específicas sobre a terra (*grid-cells* de mar são excluídas). Assim, a Europa é dividida em pixels para serem realizados os cálculos de concentração de poluentes, conforme modelo de caracterização. O modelo apresenta FC *midpoint* (PFO) para 137 substâncias que causam formação de ozônio e, o FC para os poluentes NO_x e COVNM é de 1,0 COVNM-eq.kg⁻¹.

Incertezas

O tempo de residência do ozônio na atmosfera é de aproximadamente 2 dias, segundo Fiore et al. (2002), o que pode afetar os continentes vizinhos e vice versa. Assim, o modelo de Van Zelm et al. (2008) leva em consideração emissões para fora do sistema do modelo

(Europa), o que pode levar a superestimação dos FIs. Especialmente para o NO_x , já que este tem um potencial de transporte relativamente grande (GALPERIN et al., 1995, apud VAN ZELM et al., 2008).

O modelo de Van Zelm et al. (2008) diferencia o local e a altura das fontes de emissão dos precursores, somente para a formação de MP_{10} . Demonstrando que há a diferenciação entre emissões altas ($>10\text{m}$) e emissões baixas ($\leq 10\text{m}$), portanto, há diferença na formação do poluente final, conforme a altura das fontes de emissões. Porém, esta diferenciação de fontes e suas respectivas alturas, não são consideradas para a formação de *smog* fotoquímico.

4.1.3 Modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999) - método CML-IA *baseline*

O modelo de caracterização elaborado por Derwent et al. (1996;1998); Jenkin e Hayman (1999), calcula o Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímico (PCOF) para 120 COVs individuais. O método de AICV CML-IA *baseline*, faz uso deste modelo para obter um FC *midpoint* (PCOF para 131 substâncias) que representa a categoria de impacto Oxidação Fotoquímica, expressa em $\text{kg C}_2\text{H}_4 \text{ eq.kg}^{-1}$ (C_2H_4 - etileno).

Para o cálculo dos PCOFs de cada substância específica, o modelo faz uso de um mecanismo químico altamente detalhado, Mecanismo Químico Principal (MQP), descrito em Derwent et al. (1996; 1998). O MQP foi empregado em um modelo de trajetória fotoquímica, usando uma trajetória de massa de ar realista para a formação de ozônio em escala real, através no noroeste da Europa, com o objetivo de estimar a mudança incremental de ozônio produzido, devido a uma emissão adicional de cada componente orgânico (DERWENT et al., 1998).

O modelo utilizou a situação meteorológica anti-ciclônica dos ventos de leste, que levou a um amplo fluxo de ar, transportando massas de ar poluídas fotoquimicamente para fora da Europa, em direção às ilhas Britânicas. Estas condições, com episódios de vários dias de formação de *smog* no noroeste da Europa, são consideradas típicas, segundo Derwent et al. (1998). Os dados meteorológicos e os detalhes do inventário de emissões (incluindo os COVs), dos anos 1980 a 1985 foram cuidadosamente escolhidos, pois refletem um cenário propício para a formação do fenômeno e são os mesmos utilizados em Derwent et al. (1996).

A resolução utilizada em Derwent et al. (1998) foi de $1,5^\circ \times 1,5^\circ$ para regiões externas as de interesse no estudo, de $0,5^\circ \times 0,5^\circ$ na região de interesse e, de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ no norte do Reino Unido, a mesma resolução utilizada no trabalho de Derwent et al. (1996).

4.1.3.1 Descrição do Mecanismo Químico Principal (MQP)

O MQP ou “*Master Chemical Mechanism – MCM*” é um mecanismo químico de “referência” altamente detalhado, que descreve a degradação troposférica em fase gasosa de uma série de COVs primários emitidos, além disso, a geração resultante de ozônio e outros poluentes secundários, em condições apropriadas para a camada limite planetária (SAUNDERS et al., 2003).

O princípio fundamental subjacente do MQP é a química considerada responsável pela degradação dos compostos orgânicos e a produção associada de ozônio e outros poluentes secundários. Esta construção foi estudada em laboratório e em sistemas de câmara de *smog* (DERWENT et al., 1998). Sendo assim, o MQP é particularmente adequado para uma avaliação comparativa da formação de poluentes secundários, como o ozônio, oriundos da oxidação de COVs na troposfera (JENKIN e HAYMAN, 1999).

O MQP, empregado no modelo de trajetória fotoquímica, compreende mais de 2.400 espécies químicas (fluxos elementares) e mais de 7.100 reações químicas. Para cada uma das 9 (nove) fontes principais identificadas no inventário de emissões do Reino Unido, os fluxos elementares e as equações, foram empregadas para descrever: a) os 120 compostos orgânicos associados à formação regional de ozônio, em condições apropriadas na camada limite poluída sobre o noroeste da Europa (DERWENT et al., 1998); b) a oxidação do metano; c) os 95 componentes orgânicos no inventário de COV específicos da União Europeia (UK PORC, 1993); d) os 24 compostos orgânicos adicionais; e) o monóxido de carbono; f) o SO₂; g) os NO_x (SAUNDERS et al., 1997).

O MQP consiste de um número de elementos identificáveis e separados, segundo Derwent et al. (1998):

- *As reações químicas inorgânicas* de átomos simples e radicais contendo oxigênio, hidrogênio, nitrogênio, enxofre e monóxido de carbono, empregando taxas de coeficientes pegos das avaliações de Atkinson et al. (1992; 1996) e DeMore et al. (1994);
- *As reações de fotólise* das espécies inorgânicas fotoquimicamente lábeis e de um grande número de compostos oxigenados orgânicos. Aproximadamente 1.300 reações de fotólise foram representadas;
- *A degradação atmosférica de 120 componentes orgânicos* com a exceção de 18 componentes aromáticos, a química foi construída usando um protocolo descrito em detalhes previamente em Jenkin et al. (1997).

Experimento e comparação do modelo de base

Um experimento foi realizado, em que o sistema com mais de 2.400 equações diferenciais rígidas simultâneas, foram integradas com a ordem variável do método de Gear FACSIMILE (CURTIS e SWEETENHAM, 1987). As concentrações iniciais da troposfera foram estabelecidas a partir de uma situação real da camada poluída. Assim, os cálculos da concentração de ozônio com o MQP no caso base começaram com 50 ppb, com uma parcela de ar na Europa Central e aumentaram para 53 na primeira tarde. Nos dias seguintes, a produção de ozônio seguiu significativamente e a máxima no meio da tarde foi aumentando para 58 ppb, 70 ppb, 100 ppb e para 125 ppb no quinto dia, concentração em que a massa de poluente aéreo atingira a fronteira Inglaterra-Gales (DERWENT et al., 1998).

Após o experimento, o modelo de trajetória fotoquímica foi comparado com outros dois mecanismos de dados de câmara de *smog*, o CBM-IV (GERY et al., 1989) e o CAL (LURMANN et al., 1987). As diferenças encontradas nas concentrações de ozônio, entre os mecanismos, são consideradas insignificantes. Estas diferenças, estão dentro da precisão e incertezas associadas à modelagem do MQP, pois estão condicionadas às incertezas nas emissões de precursores, aquelas introduzidas pela negligência das nuvens e aerossóis, nos cálculos dos coeficientes da taxa de fotólise, e pela pressuposição de mistura completa dentro das parcelas de ar. Durante as condições diurnas, as concentrações de ozônio em escala regional estimadas com o MQP, estavam em concordância demonstrável com os mecanismos de câmara de *smog* durante cada um dos cinco dias do experimento modelo (DERWENT et al., 1998).

A produção de ozônio em escala regional, estimado com o MQP, mostrou-se de acordo com os outros dois mecanismos (CBM-IV e CAL). Todos geram PCOFs que mostram o mesmo progresso (aromáticos > alcenos > alcanos), demonstrando que o modelo apresenta confiabilidade nos resultados (DERWENT et al., 1998).

4.1.3.2 Valores de PCOF para os 120 compostos orgânicos

Valores de PCOF são determinados por cálculos de formação de ozônio em um período de quase 5 (cinco) dias, sobre uma trajetória em linha reta originária sobre a Áustria e terminando no sul das ilhas Britânicas (JENKIN e HAYMAN, 1999).

O PCOF para cada hidrocarboneto específico foi calculado a partir dos resultados de um experimento em um modelo separado, cada um variando o cenário de caso base. Em cada experimento, empregou-se um termo de emissão adicional de $4,7 \text{ kg.km}^{-2}$ para cada hidrocarboneto do trabalho de Derwent et al. (1998); e incrementos em 1 kton por $0,5^\circ \times 0,5^\circ$

por ano em todo o domínio do modelo de Jenkin e Hayman (1999). Este aumento da emissão de hidrocarbonetos estimulou a formação de ozônio adicional com relação ao caso base, que pode ser definida para um ponto particular ao longo da trajetória ou integrada ao longo da trajetória. Estes aumentos de ozônio foram comparados com os aumentos correspondentes de um hidrocarboneto de referência - o etileno (eteno), sendo por definição, valor 100 para eteno. O PCOF para um hidrocarboneto particular “i”, foi definido pela equação (10) (DERWENT et al., 1998; JENKIN e HAYMAN, 1999):

$$PCOF_i = \frac{\text{Aumento do ozônio com o hidrocarboneto i}}{\text{Aumento do ozônio com o etileno (eteno)}} \times 100 \quad (10)$$

Incertezas

O modelo apresenta confiabilidade nos resultados, uma vez que os PCOFs estimados por meio do MQP mostraram-se semelhantes aos resultados de outros mecanismos. O MQP é detalhado e complexo, necessitando de conhecimento prévio em química de formação de oxidantes para um bom entendimento do mesmo.

Existem duas versões do método CML-IA disponíveis no *software* SimaPro® versão 8.3.0.0: (1) o CML-IA *baseline* com 10 categorias de impacto, o qual é recomendado para estudos simplificados; e (2) o CML-IA *non-baseline* que é a versão extensa, que inclui outras categorias de impacto, bem como variações de impacto existentes (SIMAPRO, 2016; PRé Consultants, 2016).

O método CML-IA *baseline* apresenta PCOF de 131 substâncias, calculados por Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999). Porém, não apresenta o PCOF para NO_x e COVNM em seu inventário, substâncias consideradas importantes na formação dos oxidantes fotoquímicos.

O método CML-IA *non-baseline* apresenta 6 (seis) categorias de impacto diferentes para o potencial de formação de *smog* fotoquímico: *Photochemical oxidation (low NO_x)*: PCOFs para baixas concentrações de NO_x obtido de Andersson-Sköld et al. (1992); *Photochem. oxid. (MIR; very high NO_x)*; *Photochemical oxidation (MOIR very low NO_x)*; *Photochemical oxidation (EBIR; low NO_x)* obtidos de Carter et al. (1997), sendo todas para efeitos a curto prazo, MIR para concentrações muito altas de NO_x e, MOIR e EBIR para baixas concentrações de NO_x, segundo Guinée (1999); *Photochem. Oxid. (incl. NO_x and NMVOC av.)*; e *Photochem. Oxid. (incl. NMVOC av.)*, estas duas últimas categorias de impacto apresentam PCOF para 130 e 129 substâncias em seus inventários, respectivamente. Estas substâncias são as mesmas

presentes no modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999), do método CML-IA *baseline*, com exceção: do Xileno, do NO_x e do COVNM presentes nestes dois modelos, e das substâncias CO_{biogênico}, CO_{fóssil}, CH₄-biogênico, CH₄-fóssil e óxido de enxofre (SO), presentes no modelo do método CML-IA *baseline*.

Cada categoria de impacto descrita acima apresenta resultados diferentes para um mesmo estudo de caso. Logo, cuidados na escolha destas categorias devem ser tomados, baseados nos princípios do estudo, para uma melhor ACV.

4.1.4 Modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2016) - ReCiPe 2016

Van Zelm et al. (2016) desenvolveram FC (*midpoint* e *endpoint*) em escala global, com o ano base de 2010, para danos à saúde humana devido à emissão de NH₃, NO_x, SO₂ e MP_{2,5} primário (material particulado com diâmetro aerodinâmico menor ou igual a 2,5µm), que contribuem para a formação de MP_{2,5}, e para danos à saúde humana e danos aos ecossistemas devido à emissão de NO_x e COVNM, que contribuem para a formação de *smog* fotoquímico. Neste trabalho, somente as emissões que contribuem para a formação de *smog* fotoquímico, foram abordadas.

Para proporcionar mais detalhes espaciais em escala global para ambos os impactos (danos na saúde humana e na vegetação - *midpoint* e *endpoint*), os FC desenvolvidos por Van Zelm et al. (2016) são globalmente aplicáveis e espacialmente explícitos. Assim, o modelo global de transporte químico TM5 (HUIJNEN et al., 2010) foi aplicado para determinar os FI para os danos à saúde humana e os FDe para os danos ao ecossistema, devido à inalação ou exposição ao ozônio para 56 regiões fonte (ou seja, regiões de origem do precursor) e 56 regiões receptoras. Os FE em regiões específicas e FDa foram derivados, usando taxas de mortalidade respiratória, concentração pré-existente⁴ e anos de vida perdidos (VAN ZELM et al., 2016).

Este modelo é utilizado pelo método ReCiPe 2016, o qual é uma versão atualizada do ReCiPe 2008. Esta atualização focou em (1) providenciar FC que são representativos para a escala global, mantendo a possibilidade de uma série de categorias de impacto obterem os FC em escala continental ou de país; (2) melhorar os métodos para obter FC em nível *midpoint* e *endpoint*. O método buscou utilizar modelos de caracterização que refletem o atual estado da arte da ciência da AICV (HUIJBREGTS et al., 2016; 2017).

⁴ Concentração pré-existente: concentração das substâncias na atmosfera, antes de simular que um determinado produto irá aumentar a concentração das substâncias no local, devido às suas emissões naquele local.

4.1.4.1 Fator de Caracterização endpoint - danos à saúde humana

Os $FC_{HH,k,x,i}$ para danos à saúde humana (HH), causados por um poluente k devido emissão de uma substância precursora x , em uma região do mundo i (ano.kton^{-1}), são definidos como a mudança anual em anos de vida perdidos dos habitantes ($\text{dYLL por ano.anos}^{-1}$), causados por um poluente k devido a uma mudança na emissão da substância x na região de origem i ($\text{dM}_{x,i}$ em kton.ano^{-1}) (VAN ZELM et al, 2016). Os FC, dos NO_x e COVNM, para as 56 regiões do mundo foram obtidos pela equação (11):

$$FC_{HH,k,x,i} = \sum_j ((FI_{k,x,i \rightarrow j}) \times \sum_e (FE_{e,k,j} \times FDa_{e,k,j})) \quad (11)$$

Estes FC para danos à saúde humana são compostos por um fator de inalação ($FI_{k,x,i \rightarrow j}$), um fator de efeito ($FE_{k,e,j}$), e um fator de dano ($FDa_{e,k,j}$). O $FI_{k,x,i \rightarrow j}$ é adimensional, fornecendo a inalação populacional do poluente k na região receptora j (kg.ano^{-1}), após uma mudança de emissão do precursor x na região de origem i (kg.ano^{-1}). O $FE_{k,e,j}$, representa os efeitos na saúde humana e por kg de poluente k inalado, na região receptora j . O FDa_e , descreve os anos de vida perdidos devido à doença de saúde e causada pela inalação do poluente k na região receptora j .

A Tabela 8 apresenta os FC do Brasil e a média ponderada global dos FC de NO_x e COVNM, obtidos pela equação (11). Para a escala global, os FC foram ampliados para 167 fluxos elementares, por meio de um fator de conversão (de *midpoint* para *endpoint*), segundo Huijbregts et al. (2017).

Tabela 8 - Fator de Caracterização do Brasil e média ponderada global do FC

Região de origem	Danos à saúde humana (ano.kton^{-1})	
	Substância emitida	
	COVNM	NO_x
Média ponderada global	$1,63 \times 10^{-1}$ ^a	$9,1 \times 10^{-1}$
Brasil	$1,8 \times 10^{-2}$	$4,5 \times 10^{-1}$

Fonte: Adaptada de Huijbregts et al. (2016; 2017).

Notas: ^aEste valor apresenta-se como $1,4 \times 10^{-1}$ em Van Zelm et al. (2016), porém foi considerado o valor presente em Huijbregts et al. (2016) e no relatório ReCiPe 2016 (HUIJBREGTS et al., 2017).

Observa-se na Tabela 8, que uma mesma emissão de COVNM e NO_x , causa um impacto ambiental menor quando emitida no Brasil, se comparada com a média ponderada mundial. Isto mostra que, utilizando os FC da média ponderada mundial, o impacto devido à emissão de COVNM será 7,8 vezes maior, e 2 vezes maior devido à emissão de NO_x , quando comparado

ao uso de FC específico para o Brasil. Considerando isso, o uso de modelos baseados na Europa, na América do Norte e demais regiões, podem superestimar os impactos ambientais em estudos de ACV no Brasil.

Van Zelm et al. (2016) compararam seus resultados, com FC de estudos semelhantes realizados na Europa e nos EUA. Os autores demonstraram pequenas diferenças entre eles e concluindo que, as diferenças existem devido à aplicação de modelos de transportes químicos com diferentes escalas espaciais, bem como diferentes dados de entrada para o FE e FDa.

Para danos à saúde humana devido à formação do ozônio, Van Zelm et al. (2016) obtiveram resultados com poucas diferenças aos estudos de Van Zelm et al. (2008) e Tang et al. (2016), para emissão de COVNM na Europa, provavelmente devido às especificidades de cada modelo. Van Zelm et al. (2016) obteve um FC de $1,6 \times 10^{-1}$ ano.kton⁻¹; Van Zelm et al. (2008), um FC de $3,9 \times 10^{-2}$ ano.kton⁻¹ (para concentrações médias diárias de 24h e 8h); e Tang et al. (2016), um FC de 3,5 ano.kton⁻¹ (para a concentração média das máximas de 8h diárias). Todos estes valores estão incluindo impactos fora da região em estudo.

Van Zelm et al. (2016) obteve um FC positivo ($3,1 \times 10^{-1}$ ano.kton⁻¹ – incluindo impactos fora da Europa), utilizando a "máxima média móvel ao longo de seis meses da maior concentração diária de ozônio de 1 hora" como unidade de medida da mudança de concentração (M6M em µg.m⁻³). Este foi o primeiro estudo a utilizar M6M⁵ para determinar danos à saúde humana devido à formação de ozônio (VAN ZELM et al, 2016).

Fator de inalação (FI)

A inalação de um poluente pela população é descrita por Fatores de Inalação, que quantificam a relação entre uma emissão e a inalação (VAN ZELM et al., 2008). O FI_{k,x,i→j}, dado em kg de poluente inalado por kg de poluente emitido, está expresso na equação 12:

$$FI_{k,x,i \rightarrow j} = \frac{dEXP_{k,j}}{dM_{x,i}} = \frac{dC_{k,j} \times N_j \times BR}{dM_{x,i}} \quad (12)$$

onde: o FI_{k,x,i→j} é um fator de inalação admencional, que relaciona a inalação de poluente *k* em uma região receptora *j* (dEXP_{k,j}), devido à uma mudança na emissão do precursor *x* na região de origem *i* (dM_{x,i}). A variável *k*, representa os oxidantes formados em um episódio de *smog* fotoquímico (VAN ZELM et al., 2016).

⁵ M6M: máxima média móvel ao longo de 6 meses, levando em consideração 1 hora de concentração máxima diária.

Segundo Van Zelm et al. (2016), o $dEXP_{k,j}$ pode ser calculado multiplicando a mudança na concentração do poluente k em cada região receptora j ($dC_{k,j}$), pelo número de habitantes (N_j) na região receptora j , e pela taxa de respiração média por pessoa (BR) ($4.745 \text{ m}^3.\text{ano}^{-1}$, recomendado por U.S. EPA, 1997). Para a região de origem “Brasil”, o FI devido à emissão do precursor COVNM foi de $8,60 \times 10^{-10}$, e o FI devido a emissão do NO_x foi de $2,60 \times 10^{-8}$ (VAN ZELM et al., 2016).

O número de habitantes (N_j) foi ajustado para a população ≥ 30 anos de idade do ano de 2005, dados que foram obtidos em ONU (2011), assumindo que não há efeitos nas pessoas mais jovens, este dado foi escolhido, pois todos os dados relativos ao Fator de Efeito foram baseados nesta faixa etária. Assim para o Brasil, o número de habitantes total foi considerado como sendo $1,88 \times 10^8$, representando 46% da população do país (VAN ZELM et al., 2016). O M6M foi usado como padrão de medida para a mudança na concentração do poluente k ($dC_{k,j}$), assim, apenas 1 (uma) parte das 24 (vinte e quatro) partes da taxa de respiração média (BR), e apenas 6 meses do ano foram levados em conta, para se ter consistência com o padrão de medida M6M (VAN ZELM et al., 2016) (para isso o seguinte cálculo foi realizado: $4.745/24 = 197,7/2 = 98,85 \text{ m}^3.\text{ano}^{-1}$).

Para derivar a mudança na concentração de um poluente ($dC_{k,j}$) no ambiente, após a emissão do precursor $dM_{x,i}$, Van Zelm et al. (2016) utilizaram as emissões presentes nas matrizes de sensibilidade de concentração para precursores emitidos e os poluentes finais relevantes do modelo global fonte-receptor TM5-FASST (*FAst Scenario Screening Tool for Global Air Quality and Instantaneous Radiative Forcing*). O modelo foi aplicado para cada substância precursora (NO_x e COVNM) responsável pela formação do *smog* fotoquímico (VAN ZELM et al., 2016).

MODELO FONTE-RECEPTOR GLOBAL TM5-FASST: é uma ferramenta de rápido rastreamento de cenários para qualidade global do ar e forçamento radiativo instantâneo, que foi desenvolvida a partir de simulações do modelo TM5 (KROL et al., 2005; VAN DINGENEN et al., 2009). O TM5 é um modelo de transporte químico global apresentado pela *European Commission Joint Research Center* (JRC) e aplicado antes por Rao et al. (2012) e Chafe et al. (2014). O modelo foi desenvolvido para estudos globais que requerem alta resolução regional ($1^\circ \times 1^\circ$), mas pode trabalhar em uma resolução global mais grosseira ($6^\circ \times 4^\circ$). Possui um algoritmo de zoom que introduz um refinamento no espaço e no tempo em algumas regiões predefinidas (KROL et al., 2005). O modelo utiliza campos meteorológicos, incluindo

precipitação em grande escala e precipitação convectiva e dados em nuvem, do Centro Europeu de Previsão Meteorológica de Médio Alcance (RAO et al., 2012). TM5-FASST leva em conta as características espaciais no local da emissão, bem como as características de dispersão para o mundo inteiro. O mundo é dividido em 56 regiões-fonte e em idênticas 56 regiões-receptoras, que correspondem a países ou grupos de países (VAN ZELM et al., 2016). A saída do modelo TM5 consiste na mudança da concentração de gases de cada região receptora, derivadas de resultados da concentração das emissões antropogênicas de cada *grid-cell* de 1°x1° e reduzindo em 20% as emissões do ano de 2000 para cada região de origem, obtidas em Lamarque et al. (2010).

Fator de Efeito (FE)

O $FE_{e,k,j}$ humano (dINC/dEXP) para efeitos na saúde e causado por um poluente k em uma região receptora j , é apresentado na equação (13):

$$FE_{e,k,j} = \frac{dINC_{k,j}}{dEXP_{k,j}} = \frac{CRF_{e,k,j}}{BR} \quad (13)$$

O $FE_{e,k,j}$ representa a mudança na incidência de uma doença ($dINC_{k,j}$) devido a uma mudança na exposição ($dEXP_{k,j}$), de um poluente k em uma região receptora j . OFE foi determinado dividindo a função concentração-resposta ($CRF_{e,k,j}$), em $m^3 \cdot ano^{-1} \cdot kg^{-1}$, pela taxa de respiração média por pessoa (BR), em $m^3 \cdot ano^{-1}$ (GRONLUND et al., 2015).

A função concentração-resposta de uma doença e causada por um poluente k em cada região específica j é calculada pela equação (14):

$$CRF_{e,k,j} = \frac{(RR_{e,k} - 1) \times MR_{e,j}}{(RR_{e,k} - 1) \times C_{k,j} + 1} \quad (14)$$

onde: $RR_{e,k}$ é o risco relativo de se obter um efeito na saúde e devido à exposição a um poluente k (por $\mu g \cdot m^{-3}$); $MR_{e,j}$ é a taxa de mortalidade ocasionada por uma doença respiratória que causa efeitos na saúde e em uma região receptora j (morte/pessoa/ano); e $C_{k,j}$ é a média anual da concentração pré-existente do poluente k em uma região receptora j ($\mu g \cdot m^{-3}$).

Quanto ao RR , Van Zelm et al. (2016) seguiram as recomendações de Anenberg et al. (2010) e Friedrich et al. (2011), que focaram no mundo e na Europa respectivamente, baseados em grupos de estudos norte americanos. O RR de 1,004 por $\mu g \cdot m^{-3}$ para morte por doença

respiratória causada pelo ozônio, foi baseado no estudo de Jerrett et al. (2009), os quais estudaram a morte por doença respiratória em um grupo de adultos nos EUA (com idade ≥ 30 anos), em dados de 1-h de nível máximo de ozônio diários (VAN ZELM et al., 2016).

As $MR_{e,j}$ por região, para o ano de 2005, foram obtidas da Organização Mundial da Saúde (WHO, 2014), para o Brasil o valor utilizado foi de 0,001 morte/pessoa/ano. As simulações da $C_{k,j}$ (M6M) por região, foram obtidas do modelo de transporte químico TM5 apresentado por Lamarque et al. (2010), considerando o ano de 2000 como cenário de referência das emissões, para o Brasil o valor utilizado foi de 58,4 por $\mu\text{g.m}^{-3}$ (VAN ZELM et al., 2016).

Fator de Dano (FDa)

O cálculo do $FDa_{e,k,j}$ está expresso na equação (15):

$$FDa_{e,k,j} = \frac{dYLL_{e,k,j}}{dINC_{e,k,j}} \quad (15)$$

O $FDa_{e,k,j}$ é definido como os anos de vida perdidos ($YLL_{e,k,j}$), por caso de incidência ($dINC_{e,k,j}$), os quais foram associados aos efeitos na saúde e devido ao poluente k e estimados por região receptora j , baseados nas estimativas (por região) da saúde mundial da Organização Mundial da Saúde (WHO, 2013), do ano de 2012 (VAN ZELM et al., 2016). O valor de YLL utilizado para a região Brasil, foi de 20,05 ano/caso de incidência.

Segundo Huijbregts et al. (2017), são consideradas somente as informações para doenças respiratórias (DR) para os cálculos dos FE e FDa na saúde humana devido ao ozônio. Uma vez que estes dados de entrada, contribuem muito para os anos de vida ajustados por incapacidade (DALY); e são os dados mais atualizados e menos incertos relacionados aos riscos relativos e aos anos de vida perdidos estão disponíveis em WHO (2014).

4.1.4.2 Fator de Caracterização endpoint - danos aos ecossistemas

Os FC_{ECO} para danos aos ecossistemas ($\text{km}^2.\text{ano.kton}^{-1}$) devido à formação de ozônio, são definidos como a mudança de área integrada na Fração Potencialmente Afetada (FPA⁶) de florestas e espécies de pastagem natural, devido a uma mudança na emissão de uma substância

⁶FPA – Fração Potencialmente Afetada: fração de espécies expostas a uma concentração em que a substância tóxica (O_3) exerce estresse na vegetação. É calculado a partir das concentrações medidas no ambiente e da sensibilidade das espécies ao O_3 (KLEPPER et al., 1998).

x (VAN ZELM et al., 2016). O cálculo do FC_{ECO} foi derivado de Van Goethem et al. (2013a,b), fazendo uso de um modelo de transporte químico global e de parâmetros de entrada regionalizados e globais, e é apresentado na equação (16):

$$FC_{ECO,k,x,i} = \sum_g \sum_n (FDe_{k,x,i \rightarrow g} \times FE_{n,k,g}) \quad (16)$$

onde: o $FDe_{k,x,i \rightarrow g}$, ($\text{ppm.h.ano.kton}^{-1}$), é a relação entre a formação do poluente k devido a emissão de uma substância precursora x na região de origem i , e a sua exposição ao ozônio k na região receptora g ; o $FE_{n,k,g}$ ($\text{km}^2.\text{ppm}^{-1}.\text{h}^{-1}$), é a relação entre a exposição do ozônio k que causa danos à uma vegetação natural n (floresta ou pastagem), em uma região receptora g . O FC do Brasil e de uma média ponderada global (escala global) do FC estão presentes na Tabela 9. Para a escala global, os FC foram ampliados para 167 substâncias, por meio de um fator de conversão segundo Huijbregts et al. (2017).

Tabela 9 - Fator de Caracterização do Brasil e média ponderada global do FC

Região de origem	Danos aos ecossistemas ($\text{km}^2.\text{ano.kton}^{-1}$)	
	Substância emitida	
	COVNM	NO _x
Média ponderada global	2,50	8,69
Brasil	0,12	2,75

Fonte: Adaptada de Van Zelm et al. (2016).

Observa-se na Tabela 9, que ao utilizar o FC da média ponderada mundial, o impacto ambiental será 20,8 vezes maior devido à emissão de COVNM, e 3,16 vezes maior devido à emissão de NO_x, quando comparado ao uso de FC específico para o Brasil. Destacando a importância de métodos e modelos de caracterização regionalizados.

O FC para danos aos ecossistemas devido à formação de *smog* fotoquímico encontrado por Van Zelm et al. (2016) para a Europa, assemelha-se com os resultados encontrados nos estudos de Hauschild et al. (2006) e de Van Goethem et al. (2013a).

Fator de Destino (FDe)

O FDe do ecossistema ($\text{ppm.h.ano.kton}^{-1}$) (equação 17) foi utilizado para determinar o risco do ozônio em grupos de espécies ou comunidades de plantas:

$$FDe_{k,x,i \rightarrow g} = \sum_g \frac{\Delta AOT40_g}{\Delta M_{x,i}} \quad (17)$$

O $FDe_{k,x,i \rightarrow g}$ representa a soma na mudança na $AOT40^7$ na região receptora g , pela mudança na emissão ($\Delta M_{x,i}$) do poluente precursor x na região de origem i (VAN GOETHEM et al., 2013a). O $AOT40$, foi utilizado como padrão de medida da variação da concentração cumulativa e foi derivado do modelo TM5-FASST (VAN ZELM et al., 2016).

As concentrações mensais de $AOT40$, por unidade de emissão de NO_x e $COVNM$, foram calculadas em uma resolução de $1^\circ \times 1^\circ$ a partir das concentrações de ozônio por hora do ano de referência de 2000, executadas no modelo de transporte químico TM5. Para o hemisfério Norte, as mesmas estações de crescimentos para pastagem e florestas foram consideradas, sendo elas de maio até julho e de abril até setembro, respectivamente. Para o hemisfério Sul, foram considerados os meses de novembro até janeiro para pastagem e outubro até março para florestas (VAN ZELM et al., 2016).

Os FC foram derivados da sensibilidade das concentrações das emissões (dC/dM), obtidas de uma perturbação nas emissões de 20%, considerando a não-linearidade da química do ozônio, especialmente para altas mudanças nas emissões. Contudo, para o limiar baseado na concentração do indicador ($AOT40$), há mais incertezas relacionados à não-linearidade, comparando ao uso de uma escala de concentrações linear (VAN ZELM et al., 2016).

Fator de Efeito (FE)

O $FE_{n,k,g}$ ($km^2.ppm^{-1}.h^{-1}$) (equação 18), derivado de Van Goethem et al. (2013a), faz uso de um fluxo de exposição ao ozônio baseado em experimentos, que levam em conta as condições ambientais, muito próximo da realidade. Porém, somente modelos de fluxos para algumas espécies foram considerados (VAN ZELM et al., 2016):

$$FE_{n,k,g} = \frac{\Delta FPA_{g,n}}{\Delta AOT40_g} \times A_{g,n} \quad (18)$$

O $FE_{n,k,g}$ descreve a mudança na Fração Potencialmente Afetada (FPA) de uma vegetação tipo n (florestas ou pastagens), em uma região receptora g , devido à mudança na

⁷ $AOT40$: O índice de exposição $AOT40$ é uma medida da exposição crônica ao ozônio amplamente utilizada em avaliações de risco de exposição ao ozônio (LRTAP, 2004). É a exposição acumulada de ozônio acima do valor limiar de 40 ppb ($80 \mu g.m^{-3}$), ou seja, somente concentrações de ozônio acima de 40 ppb são incluídos (IRCEL – CELINE, 2017).

exposição acumulada ao ozônio (AOT40_g) ao nível do solo na região receptora g ; em uma área ($A_{g,n}$ em m²), região receptora g , ocupada por vegetação do tipo n (VAN ZELM et al., 2016).

O FE foi determinado com dados das concentrações de AOT40 para as quais se verificou uma redução de 50% na produtividade de uma série de espécies florestais ou de pastagens (VAN GOETHEM et al., 2013a,b). Neste modelo de caracterização, foi usado o FE de ecossistemas linear, assumindo uma mudança linear na FPA com mudança de AOT40, que representa o efeito médio entre uma FPA de 0,5 e 0 (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Os valores da "concentração de AOT40 por unidade de emissão anual" por região, foram multiplicados pela correspondente área natural de pastagem ou floresta por região, utilizando como base, o banco de dados *Global Land Cover 2000* (BARTHOLOMÉ e BELWARD, 2005).

Fator de Normalização - FN

Van Zelm et al. (2016) comenta que a normalização dos resultados dos FC dá uma visão geral da magnitude relativa dos impactos. Relacionando-os com uma situação de referência comum e expressando-os em uma unidade comum para múltiplas categorias de impacto.

Em estudo, Van Zelm et al. (2016) utilizaram a carga total das atividades da sociedade do ano de 2010, como situação de referência. Os FN (equação 19) para os impactos da formação de ozônio no mundo todo, foram derivados da multiplicação dos FC para cada região específica com cada substância específica emitida em cada região no ano de 2010, dividido pela população total em todas as regiões:

$$FN_{AoP} = \frac{\sum_k \sum_x \sum_i (M_{x,i} \times FC_{AoP,k,x,i})}{\sum_i (N_i)} \quad (19)$$

onde: FN_{AoP} é o FN da soma de todas as 56 regiões por Área de Proteção Específica (AoP) (danos à saúde humana e aos ecossistemas) e por poluente k ; $M_{x,i}$ é a emissão do precursor x em uma região i (kton.ano⁻¹); $FC_{AoP,k,x,i}$ é o FC por AoP e poluente k , por substância emitida x em uma região de origem i ; e N_i é o número de habitantes na região de origem i , o qual é a soma dos habitantes do mundo obtidos de *United Nations* (ONU, 2011), segundo Van Zelm et al. (2016).

O FN para danos à saúde humana devido a emissões globais de aerossóis primários e secundários (MP e *smog* fotoquímico) em 2010 foi de $1,7 \times 10^{-2}$ ano.capita⁻¹. Neste FN, os impactos na saúde humana causados devido à formação de ozônio são insignificantes comparados aos danos causados por material particulado. O FN para danos aos ecossistemas

causados pelo ozônio foi de $1,6 \times 10^{-4} \text{ km}^2 \cdot \text{capita}^{-1}$, em que os NO_x contribuem 72% para o impacto e os COVNM, 28% (VAN ZELM et al., 2016).

4.1.4.3 Fator de Caracterização midpoint – PFOH e PFOE

Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: saúde humana (PFOH)

Na categoria de impacto *midpoint*, o aumento da inalação de O_3 troposférico foi considerado para determinar o Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: saúde humana (PFOH). Huijbregts et al. (2017) descreve que os PFOH são expressos em $\text{kg NO}_x\text{-eq.}$ no ar, dividindo o $\text{FI}_{x,i}$ pelo valor do FI do NO_x global, conforme equação (20):

$$\text{PFOH}_{x,i} = \frac{\text{FI}_{x,i}}{\text{FI}_{\text{NO}_x, \text{global}}} \quad (20)$$

onde: o $\text{PFOH}_{x,i}$ é o potencial de formação de oxidantes para a saúde humana devido emissão substância x em uma região de origem i ; $\text{FI}_{x,i}$ é o fator de inalação devido emissão de uma substância precursora x em uma região de origem i ($\text{FI}_{x,i}$ – equação (12) utilizada para determinar os FC *endpoint*); e $\text{FI}_{\text{NO}_x, \text{global}}$ é o fator de inalação do NO_x em escala global.

Para avaliar a contribuição das substâncias individuais na formação de ozônio, o conceito de PCOF descrito por Derwent e Jenkin (1991) foi utilizado. PCOF são exemplos de reatividade relativa, calculados para a formação de ozônio em um volume de ar, com o etileno como substância de referência. Para derivar os fatores de inalação para COVs individuais, os PCOF de Derwent et al. (2007b), e os PCOF médios dos COVNM de Derwent et al. (2007a) foram utilizados. A equação (21) foi utilizada para calcular os PFOH para hidrocarbonetos específicos x (HUIJBREGTS et al., 2017).

$$\text{PFOH}_x = \frac{\text{PCOF}_x}{\text{PCOF}_{\text{COVNM}}} \times \text{PFOH}_{\text{COVNM}} \quad (21)$$

onde: PFOH_x é o potencial de formação de oxidantes para a saúde humana devido emissão de um hidrocarboneto individual x ; PCOF_x é o potencial de criação de oxidantes fotoquímicos devido emissão de um hidrocarboneto individual x ; $\text{PFOH}_{\text{COVNM}}$ é o potencial de formação de oxidantes fotoquímicos para a saúde humana devido emissão do COVNM.

Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: ecossistemas terrestres (PFOE)

O aumento da exposição ao O₃ troposférico (FDe) foi considerado para determinar o Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: ecossistemas terrestres (PFOE), que relata a soma da diferença entre a concentração média horária de ozônio e a concentração de 40 ppb durante as horas com sol, sobre as estações de crescimento vegetativo (HUIJBREGTS et al., 2017).

O FDe, expresso pela equação (17), da formação do ozônio é definido pela emissão de uma substância x em uma região i (FDe _{x,i}). O PFOE é expresso em kg NO_x-eq. no ar e é calculado dividindo o FDe _{x,i} pelo FDe do NO_x global, equação (22), segundo Huijbregts et al. (2017):

$$PFOE_{x,i} = \frac{FDe_{x,i}}{FDe_{NO_x, global}} \quad (22)$$

onde: o PFOE _{x,i} é o potencial de formação de oxidantes para o ecossistema devido emissão substância x em uma região de origem i ; FDe _{x,i} é o fator de destino devido emissão de uma substância precursora x em uma região de origem i ; e FDe_{NO_x, global} é o fator de destino do NO_x em escala global.

A equação (23) foi utilizada para determinar os PFOE para hidrocarbonetos individuais (HUIJBREGTS et al., 2017):

$$PFOE_x = \frac{PCOF_x}{PCOF_{COVNM}} \times PFOE_{COVNM} \quad (23)$$

onde: PFOE _{x} é o potencial de formação de oxidantes para os ecossistemas devido emissão de um hidrocarboneto individual x ; PCOF _{x} é o potencial de criação de oxidantes fotoquímicos devido emissão de um hidrocarboneto individual x ; PFOE_{COVNM} é o potencial de formação de oxidantes fotoquímicos para os ecossistemas devido emissão do COVNM.

Os valores de PFOH e PFOE, para COVNM e NO_x, para o Brasil e para o mundo presentes nos apêndices de Huijbregts et al. (2016; 2017), estão representados na Tabela 10. Os PFOH e PFOE, em escala global, foram ampliados para 167 substâncias, as quais estão presentes nos apêndices de Huijbregts et al. (2016; 2017).

Tabela 10 - Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos para humanos e ecossistemas de acordo com as substâncias emitidas

Região	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: humanos (PFOH) (kg NO _x -eq.kg ⁻¹)		Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: ecossistemas (PFOE) (kg NO _x -eq.kg ⁻¹)	
	Substâncias emitidas			
	NO _x	COVNM	NO _x	COVNM
Brasil	0,83	0,03	0,27	0,02
Global	1,00	0,18	1,00	0,91

Fonte: Adaptada de Huijbregts et al. (2016; 2017).

Fator de Conversão de *midpoint* para *endpoint*

Para determinar os danos à saúde humana ($FC_{e,x,global}$ - *endpoint*) para as substâncias individuais em nível global, Huijbregts et al. (2016; 2017) apresentam um Fator de Conversão ($F_{M \rightarrow E, HO_3}$) de *midpoint* para *endpoint*, expresso em ano.kg NO_x-eq.⁻¹, o qual é multiplicado pelos PFOH_{x,global} (equação 24):

$$FC_{e,x,global} = PFOH_{x,global} \times F_{M \rightarrow E, HO_3} \quad (24)$$

onde: $FC_{e,x,global}$ é o fator de caracterização de uma doença *e* causada pela emissão de uma substância individual *x* em escala global; PFOH_{x,global} é o potencial de formação de oxidantes para a saúde humana causado pela emissão de uma substância individual *x* em escala global; $F_{M \rightarrow E, HO_3}$ é um fator de conversão de *midpoint* para *endpoint* (para danos à saúde humana devido a formação de O₃).

Para determinar os danos aos ecossistemas ($FC_{e,x,global}$ - *endpoint*) para as substâncias individuais em nível global, Huijbregts et al. (2016; 2017) apresentam um Fator de Conversão ($F_{M \rightarrow E, O_3}$) de *midpoint* para *endpoint*, expresso em espécie.ano.kgNO_x-eq.⁻¹, o qual é multiplicado pelos PFOE_{x,global} (equação 25):

$$FC_{e,x,global} = PFOE_{x,global} \times F_{M \rightarrow E, O_3} \quad (25)$$

onde: $FC_{e,x,global}$ é o fator de caracterização de uma doença *e* causada pela emissão de uma substância individual *x* em escala global; PFOE_{x,global} é o potencial de formação de oxidantes para os ecossistemas causados pela emissão de uma substância individual *x* em escala global;

$F_{M \rightarrow E, O_3}$ é um fator de conversão de *midpoint* para *endpoint* (para danos aos ecossistemas devido a formação de O_3).

Para manter uma consistência no fator de conversão de *midpoint* para *endpoint*, este fator apresenta um valor igual ao FC de NO_x global, presente em Van Zelm et al. (2016), esta regra é válida para os danos à saúde humana e para danos aos ecossistemas terrestres. Assim, o fator de conversão ($F_{M \rightarrow E, O_3}$) devido a formação de O_3 para PFOH é de $9,1 \times 10^{-7}$ ano.kg de NO_x -eq.⁻¹, e para PFOE é de $1,29 \times 10^{-7}$ espécie.ano.kg de NO_x -eq.⁻¹, segundo Huijbregts et al. (2016; 2017).

Incertezas

Algumas incertezas do modelo, com relação ao FC para o Brasil, podem ser apontadas:

- Resolução do modelo TM5 para regiões tropicais: Huijnen et al. (2010) comprovou que o modelo TM5 simula adequadamente a variabilidade sazonal e espacial do ozônio e do NO_2 , em relação às medições dentro de 10ppbv de ozônio. Somente para alguns pontos de medições em regiões de origem tropicais, o modelo tende a subestimar o ozônio na troposfera livre, isso se deve ao uso de uma resolução baixa ($1^\circ \times 1^\circ$ - $100 \times 100 km^2$). Segundo Cavalcanti et al. (2013), se a escala do fenômeno for maior do que a resolução do modelo, o fenômeno pode não ser representado de forma correta. Principalmente devido à rápida reação do ozônio com o NO para formar NO_2 , assim, as concentrações de ozônio tendem a ser menores próximas às fontes de NO (TONG et al., 2006). Podendo causar uma subestimação da concentração do ozônio e apresentar frações de ingestão negativas;
- Número de habitantes considerado: o modelo considera que apenas pessoas com idade ≥ 30 anos sofrem influências negativas da ação do ozônio. Contudo, segundo estudo da UNEP (2016), o ozônio é particularmente perigoso para crianças, idosos e pessoas com doença pulmonar ou cardiovascular, indiferente da faixa etária;
- Arquétipos: o modelo de transporte químico utilizado (TM5-FASST) não leva em consideração a diferença entre os arquétipos (áreas urbanas, rurais ou remotas), no cálculo do FI, apresentando um FC único para todo o país. O Brasil é o quinto país em área territorial e população do mundo, porém, esta população não está distribuída uniformemente pelo território, logo, regiões metropolitanas estão mais sujeitas à episódios de *smog* fotoquímico do que regiões remotas como o estado do Amazonas, por exemplo;

- Fontes de emissões: o modelo não leva em consideração as fontes de emissões e nem a altura destas, ou seja, não há diferenciação entre emissões de precursores oriundos de fontes industriais e veiculares;
- Substâncias: para o Brasil, o modelo apresenta FC (*midpoint* e *endpoint*) para COVNM e NO_x, porém diversas substâncias contribuem para a formação do fenômeno *smog* fotoquímico. Como observa-se para os FC globais, há a necessidade de valores regionalizados (Brasil) de PCOF para diversas substâncias, como por exemplo, os valores de Derwent et al. (2007a,b) em nível global.

Para o cálculo dos FC, o modelo elaborado por Van Zelm et al. (2016) faz uso de valores nacionais para a taxa de mortalidade, da concentração pré-existente dos precursores, do número de pessoas com idade ≥ 30 anos e do valor dos anos de vida perdidos por caso. Para os valores do risco relativo (RR) de se obter uma doença devido à exposição ao *smog* fotoquímico e a taxa de respiração média por pessoa, são médias mundiais aplicadas para todas as 56 regiões consideradas pelo estudo.

4.1.5 Modelo de caracterização de Van Goethem et al. (2013)

Van Goethem et al. (2013a) desenvolveu uma relação quantitativa de exposição-efeito pelo ozônio troposférico na vegetação natural (florestas e pastagem natural), a qual pode ser usada para incluir os efeitos do ozônio nos ecossistemas naturais na AICV.

O objetivo deste estudo foi determinar FC *endpoint* para regiões específicas pelo dano na vegetação natural devido ao ozônio troposférico (*smog* fotoquímico), causado pelas emissões antropogênicas de NO_x e COVNM do ano de 2010. Assim, FC foram definidos para 65 regiões da Europa separadamente e, subsequentemente, comparadas com avaliações de diferentes impactos entre as regiões. Os FC foram baseados em 87 espécies de pastagem e 9 espécies de árvores. As relações que descrevem os efeitos ecológicos de um poluente, foram baseadas numa relação lognormal entre a Fração Potencialmente Afetada (FPA) e a concentração pré-existente de ozônio (VAN GOETHEM et al., 2013a).

O modelo também apresenta Fatores de Normalização, que determinam qual substância tem maior contribuição para os danos na vegetação natural pela exposição ao ozônio (VAN GOETHEM et al., 2013a).

4.1.5.1 Fator de Caracterização endpoint - danos aos ecossistemas

O FC (equação 26) consiste em um FDe, que quantifica a relação entre a emissão de uma substância precursora e a exposição ao ozônio, e um FE, que quantifica a relação entre a exposição ao ozônio e os danos à vegetação natural:

$$FC_{x,i,e} = \sum_j \sum_e (FDe_{x,i \rightarrow j} \times FE_{j,e}) \quad (26)$$

onde: $FC_{x,i,e}$ é o fator de caracterização de um precursor emitido x que é exposto na vegetação do tipo e (floresta ou pastagem) em uma região de origem i ; $FDe_{x,i \rightarrow j}$ é o fator de destino de um precursor emitido x em uma região de origem i , que tem destino em uma região j ; $FE_{j,e}$ é o fator de efeito sobre uma vegetação do tipo e em uma região de destino j .

Foram calculados FC ($m^2 \cdot ano \cdot kg^{-1}$) para as 65 regiões da Europa e um FC específico para a Europa (Tabela 11). Esses foram definidos como a mudança na área integrada na FPA de uma floresta ou espécies de pastagem natural, devido a mudança na emissão de substâncias precursoras de ozônio, NO_x e COVNM ($m^2 \cdot ano \cdot kg^{-1}$). A exposição ao ozônio foi expressa como a soma das diferenças entre a concentração horária média de ozônio e 40 ppb durante as horas do dia e as estações de crescimento (AOT40 em ppm.h) (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Tabela 11 - FC ($FPA \cdot m^2 \cdot ano \cdot kg^{-1}$) para a vegetação natural por COVNM e NO_x para lognormal, média e linear na Europa em 2010

Região	COVNM			NO _x		
	Lognormal	Média	Linear	Lognormal	Média	Linear
Europa	1,64	0,20	4,81	5,60	0,66	16,39

Fonte: Adaptada de Van Goethem et al. (2013a).

Usando o teste de correlação de Pearson para todas as regiões de emissões, Van Goethem et al. (2013a) encontraram uma correlação entre o FC e o $\sum FDe$, indicando que ambos os fatores, de efeito e de destino, contribuem significativamente para a diferenciação espacial encontrada para o FC.

Fator de Destino (FDe)

O $FDe_{x,i \rightarrow j}$ parcial ($ppm \cdot h \cdot ano \cdot kg^{-1}$) representa a mudança na AOT40 em uma *grid cell* receptora j ($AOT40_{i,j}$ - ppb.h), devido a uma mudança na emissão de um precursor x (NO_x e COVNM) na região de origem i (ΔM_i - $kg \cdot ano^{-1}$), segundo equação (27):

$$FDe_{x,i \rightarrow j} = \frac{\Delta AOT40_j}{\Delta M_i} \quad (27)$$

onde: $AOT40_{i,j}$ é a mudança de AOT40 em uma região receptora j (ppb.h); ΔM_i é a mudança na emissão de um precursor x (NO_x e COVNM) na região de origem i ($kg.ano^{-1}$).

O FDe para o continente Europeu foi determinado por meio do modelo de transporte químico atmosférico EMEP. Este simula as emissões, o transporte atmosférico, a transformação química e a remoção do ar de NO_x e COVNM, estimando a concentração de ozônio ao nível do solo, por meio de um conjunto de relações fonte-receptor em nível regional (TARRASÓN, 2009a).

Modelo de transporte químico atmosférico EMEP: o modelo Euleriano unificado EMEP foi utilizado para derivar o FDe para a exposição ao ozônio, essa exposição é tomada ao longo do tempo e apenas durante o dia (TUOVINEN, 2000). Para calcular os FDe(s) da vegetação de pastagem, a mudança no AOT40 em 1 (um) metro acima do nível do solo foi utilizada. Para a vegetação das árvores, a altura do dossel superior (3m) foi utilizada. O modelo divide a Europa em 65 regiões fonte de emissões, e *grid cells* receptoras de $0,5^\circ \times 0,5^\circ$ (VAN GOETHEM et al., 2013a). Para derivar FDe parcial, as emissões de NO_x e COVNM diminuem em 15%, comparando com o inventário de emissões de referência de cada região. Os 15% representam uma mudança realista quase-marginal das emissões, mas ainda permite assumir uma linearidade suficiente e uma redução na mudança de impactos para uma unidade de mudança de emissões (TARRASÓN, 2009b). Fatores de dano são determinados para cada região, por meio de poluentes precursores e emissões pré-existentes do ano de 2010. O conjunto de dados de emissões para 2010 corresponde a um cenário base da Legislação Atual (*Current Legislation – CLE*), desenvolvido pela IIASA para o desenvolvimento Temático Estratégico do Ar (AMANN et al., 2008; TARRASÓN, 2009b). Devido à variabilidade interanual na meteorologia, foram obtidos resultados médios baseados na média dos anos meteorológicos 1996, 1997, 1998 e 2000, os quais representam as condições climáticas dos últimos 30 anos (TARRASÓN, 2009a). No modelo, somente áreas EMEP são consideradas, sendo que as áreas receptoras fora desta abrangência não são consideradas nos cálculos do FDe. Como resultado, as emissões de NO_x e COVNM vão ser subestimadas nas áreas integradas à exposição do ozônio, pois impactos devido ao ozônio fora das áreas receptoras não são consideradas (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Em seu estudo, Van Goethem et al. (2013a) comenta que o modelo Euleriano unificado EMEP já passou por validações, comprovando que representa a formação do ozônio na Europa e que está de acordo com dados observados. Em estudos elaborados por Vautard et al. (2007) e Van Loon et al. (2007), que comparam o EMEP com modelos de transporte químico atmosférico como o LOTOS-EUROS e o TM5, indicam que o EMEP dá resultados que estão em linha com as médias, as máximas e o ciclo diurno, medidos no verão, os quais são importantes para os modelos de AOT40 (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Contudo, ainda existem diversas incertezas na derivação dos FDe para a formação do *smog* fotoquímico (ozônio). Estas incertezas podem estar relacionadas à complexidade da química não-linear na criação do *smog* fotoquímico, às interações entre os precursores NO_x e COVNM, às condições meteorológicas e aos inventários de emissões. Como também, com relação à mistura de diferentes COVNMs, que pode ser diferente através de regiões e setores, contudo, o atual FDe é uma média para uma mistura comum dos COVNMs (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Fator de Efeito (FE)

O $FE_{j,e}$ (m².ppm⁻¹) é a mudança na FPA de espécies de vegetação *e* (árvores e pastagem) em uma *grid-cell* *j* devido a uma mudança na exposição ao ozônio (VAN GOETHEM et al., 2013a). Os FEs são derivados seguindo os quatro passos descritos a seguir.

No primeiro passo, as relações entre a exposição ao ozônio e os danos causados às florestas e pastagens foram calculadas usando a exposição-resposta específica de espécies baseadas em estudos experimentais de Van Goethem et al. (2013b). Contudo, nenhuma distinção foi feita entre espécies de pastagem anual e perene, pois nenhum dado da *grid-cell* específica da área estava disponível (VAN GOETHEM et al., 2013a).

A exposição AOT40 de uma espécie específica foi usada para derivar valores de EC50⁸ para árvores e espécies de pastagem. O EC50 específico da espécie é igual ao AOT40, no qual existe uma redução de 50% na biomassa comparado a uma situação com nenhuma sobre-exposição ao ozônio (ex: AOT40=0). O EC50 foi selecionado seguindo a mesma abordagem empregada para toxicidade em ACV por Rosenbaum et al. (2008) (VAN GOETHEM et al., 2013a).

No segundo passo, foi usado o valor do EC50 para derivar uma Distribuição da Sensibilidade das Espécies (DSE) para uma respectiva floresta e espécies de pastagem natural,

⁸ EC50: concentração da substância que induz metade do efeito máximo (SEBAUGH, 2011), refere-se à concentração do O₃ na qual observa-se uma redução de 50% da biomassa da planta.

levando em conta a fração de espécies com nenhuma redução na biomassa. Uma DSE representa uma distribuição acumulada da resposta do estressor, baseada em dados de sensibilidade de uma única espécie. Assumindo uma distribuição lognormal das espécies para a exposição ao ozônio (VAN GOETHEM et al., 2013a), a FPA pode ser derivada pela equação (28):

$$FPA_{j,e} = \frac{1 - f_{nbd}}{\sigma_e \times \sqrt{2 \times \pi} \times AOT40_{j,e} \times \ln 10} \times \int_0^{AOT40} \exp \times \left(-\frac{1}{2} \times \left(\frac{\log(AOT40_{j,e}) - \mu_e}{\sigma_e} \right)^2 \right) dAOT40 \quad (28)$$

onde: $AOT40_{j,e}$ representa a concentração ambiente de ozônio em uma região j da vegetação tipo e (floresta ou pastagem natural); μ_e é a média dos valores de $^{10}\log EC50$ para ozônio em $AOT40$ (ppm.h), como observado para diferentes espécies na vegetação do tipo e ; f_{nbd} é a fração de espécies com nenhuma redução de biomassa; e σ_e é o desvio padrão dos dados de $^{10}\log EC50$ dentro da vegetação tipo e (VAN GOETHEM et al., 2013a).

No terceiro passo, foi calculada a mudança marginal da FPA devido à mudança marginal na exposição ao ozônio ao nível do solo (ppm.h), segundo equação (29):

$$\frac{\partial FPA_{j,e}}{\partial AOT40_j} = \frac{1 - f_{nbd}}{\sigma_e \times \sqrt{2 \times \pi} \times AOT40_{j,e} \times \ln 10} \times \exp \times \left(-\frac{1}{2} \times \left(\frac{\log(AOT40_{j,e}) - \mu_e}{\sigma_e} \right)^2 \right) \quad (29)$$

No quarto passo, a abordagem do Fator de Efeito Marginal (FEM) foi utilizada como o padrão para o estudo. O interesse em AICV, geralmente reside na avaliação da influência de pequenas mudanças de emissão. Assim, o FEM da *grid* específica por tipo de vegetação foi definido pela equação (30) (VAN GOETHEM et al., 2013a):

$$FEM_{j,e} = \frac{\partial FPA_{j,e}}{\partial AOT40_j} \times A_{j,e} \quad (30)$$

onde: $\partial FPA_{j,e}$ é a mudança na fração potencialmente afetada de uma vegetação do tipo e em uma *grid* j ; $\partial AOT40_j$ é a mudança da concentração $AOT40$ em uma *grid* j ; $A_{j,e}$ é a área (m^2) ocupada pela vegetação do tipo e em uma *grid* j .

Os dados de $\partial AOT40_j$ foram baseados nas concentrações de $AOT40$ pré-existent de 2010, determinados pelo modelo EMEP (SIMPSON et al., 2003). Para a vegetação de

pastagem, os valores de AOT40 foram baseados no crescimento sazonal de maio até julho e foi usado uma altura do nível do solo de 1 (um) metro. Para a vegetação de árvores, foram usados os meses de abril até setembro e a altura do dossel superior das árvores de 3 metros. A base de dados do *Global Land Cover 2000* (BARTHOLOMÉ e BELWARD, 2005) foi usada para calcular a *grid* de uma área específica ocupada por um tipo de vegetação (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Fator de normalização (FN)

A normalização dos resultados dos FC dá uma visão da magnitude relativa dos impactos caracterizados, relacionando-os com uma situação de referência comum e expressando-os em uma unidade comum, pela multiplicação das categorias (VAN GOETHEM et al., 2013a), ou seja, indica quanto cada substância precursora contribui para o impacto.

O FN para impactos pelo ozônio na Europa são derivados da multiplicação dos FC das regiões específicas, com a emissão de cada substância precursora em cada região no ano de 2010, dividido pelo total de população em todas as regiões (VESTRENG et al., 2012). O FN é igual à FPA da área integrada de espécies de vegetação natural na Europa devido à emissão de NO_x e COVNM, per capita (FPA.m².capita⁻¹), dado pela equação (31) (VAN GOETHEM et al., 2013a):

$$FN = \frac{\sum_x \sum_i (M_{x,i} \times FC_{x,i})}{\sum_i (N_{pop,i})} \quad (31)$$

onde: FN é o fator de normalização da soma das 65 regiões de uma determinado precursor x ; $M_{x,i}$ é a emissão do precursor x (NO_x ou COVNM) em uma região i (kg.ano⁻¹); $FC_{x,i}$ é o fator de caracterização da substância x em uma região i ; e $N_{pop,i}$ é o número de habitantes na região i .

O FN para O₃ na vegetação natural devido à emissão de NO_x e COVNM, em 2010, é de 1,4x10⁻¹⁰ m².capita⁻¹. Por meio deste fator, observou-se que os NO_x e os COVNM contribuem 80% e 20%, respectivamente, para os danos devido à exposição ao ozônio na vegetação natural da Europa. Isso se deve aos FC altos e às grandes emissões de NO_x, que são 1,5 vezes maiores que as emissões de COVNM (VAN GOETHEM et al., 2013a).

Incertezas

Van Goethem et al. (2013a) apontam que as diferenças nos FE é determinado pela variabilidade: (1) na área da *grid*-específica coberta por um tipo de vegetação, a área coberta por pastagem e florestas varia por toda a Europa, em que, a contribuição relativa dos tipos de pastagem e florestas, para o FE, variam por *grid*. Sendo assim, o FE é mais preciso quanto maior a resolução da *grid*-específica e quanto mais heterogênea a vegetação é na *grid* e; (2) nos valores de AOT40 da *grid*-específica, a qual é baseada somente na concentração de ozônio, exigindo modelos de resposta bem elaborados, pois necessita de uma estimativa do fluxo de ozônio nos estômatos – que é diferente conforme o grupo vegetal.

4.1.6 Modelo de Krewitt et al. (2001) - EcoSense

O EcoSense foi desenvolvido dentro da série de Projetos ExternE em ‘*External Costs of Energy*’ fundado pela Comissão Europeia (European Commission, 1999). O modelo de destino-exposição-efeito propõe a quantificação dos impactos ambientais, por meio de um Fator de Dano (FDa), seguindo uma abordagem detalhada dos meios de impacto de um local específico. Embora o EcoSense tenha sido desenvolvido principalmente para avaliar impactos das usinas de energia, o escopo do modelo foi ampliado para abranger atividades industriais e do transporte (KREWITT et al., 2001).

O modelo foi utilizado para calcular o impacto por tonelada de SO₂, NO_x, partículas finas e COVNM emitidos em diferentes países de origem, sobre a saúde humana, a acidificação, a eutrofização e o ambiente artificial (rendimento da cultura e materiais de construções). Indicadores em nível *endpoint* (FDa) são usados para calcular os efeitos resultantes da mudança marginal nos níveis de emissão destes poluentes (KREWITT et al., 2001). Nesta dissertação, somente FDa para a saúde humana e para ambientes artificiais, por formação de O₃ troposférico, devido à emissão de NO_x e COVNM, serão considerados.

O EcoSense usa um inventário completo de emissões dos anos 1990 e 2000 (estes anos são caracterizados por níveis de emissões diferentes, e concentrações pré-existent na atmosfera diferentes), os dados foram obtidos da base de dados de CORINAR (McINNES, 1996) e do estudo IIASA (AMANN et al., 1999), respectivamente. Estas bases de dados foram utilizadas como ponto de partida para a modelagem da qualidade do ar e dos impactos, na EU-

15⁹ (excluindo Luxemburgo). Assim, foi possível analisar a contribuição de uma fonte específica de poluentes (ou grupo de fontes) para o aumento de concentrações limiares (ex. cargas críticas para ecossistemas), levando em conta a condição das concentrações pré-existentes (KREWITT et al., 2001).

Para calcular os FDas em regiões dependentes, Krewitt et al. (2001) aumentaram em 10%, o total de emissões nacionais do respectivo poluente para países individuais. A razão para isso, segundo Krewitt et al. (2001), são:

- *Mudanças nas emissões em nível de país*: a alocação de uma fonte de emissão de um país não é necessariamente muito precisa. Uma vez que em países grandes, as condições ambientais podem variar significativamente entre diferentes regiões. Contudo, o modelo leva em conta a atual distribuição espacial das fontes de emissões dentro do país, isto é, ele não considera que as cargas de emissões vão ser distribuídas uniformemente pelo país. Para isso, a modelagem de destino-exposição-efeito é baseada em uma *grid-cell* que produz uma maior resolução espacial (0,5°x0,5°). Assim, o uso de valores médios nacionais, pelo menos na Europa, parece ser uma abordagem pragmática razoável;
- *Aumento das emissões nacionais para 10%*: esta abordagem foi considerada como um compromisso pragmático entre uma análise marginal e média. Uma mudança de 10% nas emissões não é considerado como um desvio tão grande e, ao mesmo tempo, permite uma certa generalização dos resultados.

O EcoSense fornece a qualidade do ar harmonizado e modelos de avaliação de impactos, juntos com um compreensivo conjunto de dados de entrada relevantes para todo o EU-15, que permite uma avaliação de impacto de cada região específica. Para abranger diferentes poluentes e diferentes escalas, o EcoSense faz uso de 3 modelos de qualidade do ar integrados dentro do sistema (KREWITT et al., 2001):

1. *The Industrial Source Complex Model (ISC)* - o modelo complexo de origem industrial: é um modelo de pluma gaussiana desenvolvida por U.S. EPA (BRODE e WANG, 1992). O ISC é usado para modelos de transporte de poluentes primários do ar em escala local de *sub grid-cell* 0,1°x0,1°. Dentro do EcoSense é configurado para calcular a concentração de substâncias não reativas;
2. *The Windrose Trajectory Model (WTM)* - modelo de trajetória da rosa dos ventos (TRUKENMILLER e FRIEDRICH, 1995): é usado no EcoSense para estimar a

⁹ EU-15: compreende os seguintes 15 países da Europa: Áustria, Bélgica, Dinamarca, Finlândia, França, Alemanha, Grécia, Irlanda, Itália, Luxemburgo, Países Baixos, Portugal, Espanha, Suécia e Reino Unido.

concentração e a deposição de espécies ácidas em escala regional e, para espécies de nitrogênio e enxofre atmosférico, em uma escala de $0,5^\circ \times 0,5^\circ$;

3. *The Source-receptor Ozone Model (SROM)* - modelo de fonte-receptor de ozônio: é usado para estimar a concentração de ozônio sobre a Europa e, no EcoSense, é baseado nas relações de fonte-receptor (SIMPSON et al., 1997). Dados de entrada de emissões nacionais anuais de NO_x e COVNM a partir de 37 países europeus, enquanto as saídas são calculadas individuais pelo EMEP em *grid-cell* quadrada de $1,5^\circ \times 1,5^\circ$, empregadas por matrizes em países. Levando em conta a não linearidade da criação do ozônio, o SROM utiliza um procedimento de interpolação, que permite que a relação fonte-receptor varie de acordo com o nível de emissão de cada país em causa (SIMPSON e ELIASSEN, 1997).

Os modelos de avaliação de impacto calculam os impactos físicos aplicando as funções de exposição-resposta a cada *grid-cell* europeia ($0,5^\circ \times 0,5^\circ$), levando em consideração as informações sobre a distribuição dos receptores e os níveis de concentração dos poluentes atmosféricos a partir da base de dados (KREWITT et al., 2001).

4.1.6.1 Impactos à saúde humana – Fator de dano

Para quantificar os efeitos adversos à saúde humana devido ao aumento da concentração de oxidantes fotoquímicos no ar, foi utilizado o indicador YOLL.kton^{-1} - anos de vida perdido por quilo tonelada, devido ao aumento de 10% das emissões de COVNM e NO_x emitidos, para cada um dos países da EU-15 (excluindo Luxemburgo) e uma média destes.

Em adição ao indicador YOLL, foi usada a exposição acumulada como um indicador de pressão sobre a saúde humana, que definitivamente não é enviesada por quaisquer suposições e incertezas relacionadas para efetuar a modelagem. A exposição acumulada é definida como a mudança na concentração de uma emissão, que é calculada para cada *grid-cell* do domínio da modelagem, multiplicada ao número de pessoas morando na respectiva *grid-cell* e resumido sobre o domínio de modelagem. Os modelos de dose-efeito que são usados na avaliação de impacto são recomendados por ExternE (*European Commission*, 1999). Seguindo estas recomendações, foi assumida uma relação linear entre uma mudança na taxa de mortalidade e a concentração de ozônio. Somente danos indiretos à saúde humana, a partir de NO_x e COV, foram considerados (KREWITT et al., 2001).

Krewitt et al. (2001) apresentaram os FDa (YOLL por kton de poluente precursor emitido) para 14 países da Europa (EU-15 - excluindo Luxemburgo) e um FDa referente ao EU-15 (média). Somente os YOLL por kton de COVNM e NO_x, devido à formação de O₃, para o EU-15 (média) estão presentes na Tabela 12.

Tabela 12 - YOLL para a população, resultante da emissão de 1-kton de poluente para o EU-15 (anos 1990 e 2010)

	YOLL.kton ⁻¹ de COVNM – formação de O ₃		YOLL.kton ⁻¹ de NO _x - formação de O ₃	
	1990	2010	1990	2010
EU-15	1,2	1,2	-1,0	-0,2

Fonte: Adaptada de Krewitt et al. (2001).

Observa-se na Tabela 12, que o potencial de formação de ozônio por tonelada de NO_x emitido (FDa) aumentou de 1990 até 2010. Contudo, esta situação difere muito conforme o país. Em muitos países (Áustria, Bélgica, Dinamarca, Alemanha, Itália, Países Baixos e Reino Unido), a emissão de uma tonelada adicional de NO_x leva a uma diminuição da concentração de ozônio de 1990 a 2010, indicando que a formação de ozônio é limitada pela emissão de COVNM. O FDa para a emissão de uma tonelada de COVNM para o EU-15 (média) é igual de 1990 a 2010, porém há uma variação entre alguns países (KREWITT et al., 2001).

4.1.6.2 Impactos no ambiente artificial – Fator de dano

Para a avaliação dos diferentes efeitos do ozônio no rendimento das culturas, Krewitt et al. (2001) usaram os modelos de dose-efeito recomendados por ExternE (*European Commission, 1999*). Os efeitos previstos devido à exposição ao ozônio estão relacionados à perda do rendimento no cultivo de trigo, batata, centeio, aveia, tabaco e cevada. Estes são expressos em Custos dos Danos, ou seja, em Euro por kton de COVNM e NO_x emitidos e que contribuem para a formação de oxidantes fotoquímicos (KREWITT et al., 2001).

Krewitt et al. (2001) apresentaram os custos dos danos (EURO.kton⁻¹ de poluente precursor emitido) para 14 países da Europa (EU-15 - excluindo Luxemburgo) e um custo referente ao EU-15 (média), para os impactos no ambiente criado pelo homem (ambiente artificial). Somente os EURO.kton⁻¹ para o EU-15 (média) estão presentes na Tabela 13.

Tabela 13 - Impactos no ambiente criado pelo homem, custos dos danos resultantes das emissões de 1-kton de poluente para o EU-15 (anos 1990 e 2010)

	EURO.kton ⁻¹ de COVNM - formação de O ₃		EURO.kton ⁻¹ de NO _x - formação de O ₃	
	1990	2010	1990	2010
EU-15	723	617	-79	321

Fonte: Adaptada de Krewitt et al. (2001).

Na Tabela 13, observa-se que há uma grande diferença entre os custos dos danos entre os dois anos. Krewitt et al. (2001) concluem que há uma grande variação de custos entre os países analisados. Com relação à emissão de COVNM, os custos aumentaram de 1990 para 2010, para a Áustria, Bélgica, Dinamarca, Países Baixos, Holanda e Reino Unido. Para a Finlândia, França, Alemanha, Grécia, Itália, Portugal, Espanha e Suécia, estes custos reduziram. A média geral (EU-15) demonstra que houve uma redução de custos. Com relação à emissão de NO_x a média geral (EU-15), demonstra que houve um aumento de custos de 1990 para 2010. Sendo que, somente na Finlândia, na Grécia e em Portugal, uma redução foi observada.

Incertezas

Krewitt et al. (2001) destacam que os fatores de impactos negativos fornecem informações úteis quando se referem a prioridades ambientais. Sugerindo, por exemplo, que é mais eficaz reduzir a emissão de COVNM em vez de NO_x, para combater a formação de ozônio troposférico (*smog* fotoquímico). Porém, não se deve interpretar os fatores negativos de forma a dizer que emitir mais é benéfico ao meio ambiente. Portanto, em estudos de ACV, Krewitt et al. (2001) sugerem o uso de FC igual a zero, ao invés de fatores de danos negativos, indicando assim, que o potencial de danos ambientais é baixo em um contexto específico.

Somente para os efeitos do ozônio na saúde humana foi utilizado um modelo linear, sendo que, o modelo de fonte-receptor de ozônio (SROM) considera a formação não-linear do ozônio.

4.2 ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO DE AICV PARA A CATEGORIA SMOG FOTOQUÍMICO

Esta etapa objetivou facilitar a visualização das principais diferenças entre os modelos de caracterização selecionados; a comparação deles, por meio do preenchimento da tabela de critérios e a pontuação final desta; a descrição dos principais fatores que influenciam nos

cálculos dos FC para a categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico; como também os resultados do estudo de caso.

4.2.1 Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV

A Tabela 14 apresenta uma pré-descrição dos modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico selecionados para este estudo. Nela constam: os métodos de AICV que fazem uso destes modelos de caracterização; o nível de avaliação de cada modelo de caracterização (*midpoint* e/ou *endpoint*); a categoria de impacto ambiental avaliado; a unidade de referência e; a sua escala/região de abrangência, quando nacional é representado pelo nome do país, quando continental é representado pelo nome do continente e quando global é representado por Global.

Tabela 14 - Pré-descrição dos modelos de caracterização de AICV selecionados

Modelo de caracterização	Método de AICV	Nível de avaliação de impacto	Impacto ambiental avaliado	Unidade de referência final	Abrangência
Van Zelm et al. (2008; 2013)	ReCiPe 2008	E ^a	Danos à saúde humana (NO _x e COVNM)	DALY ^c (ano.kg ⁻¹)	Europa
		E	Danos à saúde humana (hidrocarbonetos individuais)	DALY (ano.kg ⁻¹)	
		M ^b	Aumento da concentração de O ₃ troposférico	COVNM-eq.	
Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999)	CML-IA baseline	M	Aumento da concentração de O ₃ troposférico	kg C ₂ H ₄ eq.kg ⁻¹ – etileno	Noroeste da Europa
Van Zelm et al. (2016)	ReCiPe 2016	E	Danos à saúde humana	ano.kton ⁻¹	Global - 56 regiões do mundo
		M	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Humanos (PFOH)	kg NO _x -eq no ar	
		E	Danos aos ecossistemas	km ² .ano.kton ⁻¹	
		M	Potencial de Formação de Oxidantes Fotoquímicos: Ecossistemas (PFOE)	kg NO _x -eq no ar	
Van Goethem et al. (2013)	-	E	Danos na vegetação natural	m ² .ano.kg ⁻¹	65 regiões da Europa
Krewitt et al. (2001)	EcoSense	E	Danos à saúde humana	YOLL ^d .kton ⁻¹ de COVNM	14 países da Europa
		E	Danos às plantações	Euro.kton ⁻¹ de COVNM	

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Notas: ^aE: *Endpoint*; ^bM: *Midpoint*; ^cDALY: Anos de Vida Ajustados por Incapacidade: medida de carga global da doença, expressa como o número de anos perdidos devido a problemas de saúde, incapacidade ou morte precoce (WHO, 2017). ^dYOLL: *Years of Life Lost* - anos de vida perdidos

Pode-se observar, na Tabela 14, as principais características e diferenças entre os modelos de caracterização, onde 4 (quatro) são baseados em dados do continente Europeu ou para regiões desse continente, e apenas 1 (um) modelo apresenta resultados em escala global, além de 56 regiões do mundo. Dos modelos estudados, 4 (quatro) apresentam resultados em nível de avaliação de impacto *endpoint* e 3 (três) em nível *midpoint*, sendo que alguns apresentam resultados para mais de uma categoria de impacto ambiental, independentemente de ser *midpoint* ou *endpoint*.

Cada modelo de caracterização apresenta uma forma de calcular o nível de impacto ambiental, seja ela por meio de fórmulas, modelos de transporte químico, experimentos em

câmeras de *smog* fotoquímico, etc. Sendo assim, cada modelo apresenta uma unidade de referência final diferente, dificultando assim, a comparação direta para um mesmo nível de avaliação de impacto.

Observa-se também que existem modelos de caracterização que ainda não fazem parte de nenhum método de caracterização de AICV, como é o caso do modelo elaborado por Van Goethem et al. (2013), apesar de ser reconhecido pela comunidade científica e apresentar bons resultados.

Observa-se que os modelos elaborados por Van Zelm et al. (2008; 2013) e Van Zelm et al. (2016), apresentam cálculos semelhantes para determinar os FC para danos à saúde humana. Estas semelhanças e as diferenças serão expostas com mais detalhes no item 4.2.2.1.

4.2.2 Critérios para análise comparativa

Para a avaliação comparativa dos modelos foram desenvolvidos critérios que objetivaram comparar e analisar os modelos de caracterização, por meio de especificidades de cada modelo, permitindo assim, detectar os prós e contras de cada modelo de caracterização estudado.

As Tabelas 15, 16 e 17 foram criadas baseadas na Tabela 3, presente no item 3.2.2, e no trabalho de Ugaya et al. (2016). O modelo descrito em Van Zelm et al. (2016) foi dividido em 3 (três) partes: uma para o PFOH e para o PFOE (*midpoint*); uma com relação aos FC para danos à saúde humana (*endpoint*) e; outra para danos aos ecossistemas (*endpoint*). O modelo de caracterização Van Zelm et al. (2008; 2013), também foi dividido em 2 (duas) partes, uma para o PFO (*midpoint*) e; outra para danos à saúde humana (*endpoint*). Estas divisões foram feitas com o objetivo de facilitar a comparação entre os modelos e a discussão dos mesmos. O modelo Krewitt et al. (2001) não foi dividido, pois é o único a apresentar FC para danos às plantações, assim, este modelo só foi comparado com relação ao fator de danos à saúde humana. A Tabela 15 tem foco nos modelos *midpoint*, a Tabela 16 tem foco nos modelos *endpoint* para danos aos ecossistemas e a Tabela 17 tem foco nos modelos *endpoint* para danos à saúde humana.

Tabela 15 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização em nível *midpoint*

Critérios		Níveis de classificação	Observações	Níveis de classificação	Observações	Níveis de classificação	Observações
		Van Zelm et al. (2008; 2013)		Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999)		Van Zelm et al. (2016)	
Critério 1 - Escopo		Alta	O modelo apresenta o PFO para NO _x , COVNM e para 135 substâncias individuais.	Alta	Modelo determina o PCOF para 120 COV, CO, SO ₂ e os NO _x individuais. Faz uso do MQP que é baseado em diversos estudos publicados.	Moderada	O modelo apresenta o PFOE e PFOH para NO _x , COVNM e para 165 substâncias individuais, porém com uma resolução considerada moderada.
1.1	Abrangência do escopo de aplicação	Europa		Noroeste da Europa		Global	
1.1.1	Nível de diferenciação espacial	0,25°x0,25°		0,5°x0,5°; 0,1°x0,1°		1°x1°	
1.1.1.1	Resolução espacial representa formação e dispersão do <i>smog</i>	Alta		Alta		Moderada	
1.1.2a	Nível de fluxos elementares na fonte (artigo)	2		120		2	
1.1.2b	Nível de fluxos elementares no <i>software</i>	137		131		167	
1.2	Mecanismo ambiental do modelo	<i>midpoint</i>		<i>midpoint</i>		<i>midpoint</i>	
Critério 2 - Robustez Científica		Alta	O modelo é utilizado pelo método ReCiPe2008, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.	Moderada	O modelo é utilizado pelo método CML-IA <i>baseline</i> . Porém, não deixa claro todas as fórmulas e variáveis utilizadas nos cálculos do PCOF e nem como o MQP foi calculado ou obtido.	Alta	O modelo é utilizado pelo método ReCiPe 2016, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.
2.1	Faz parte de um método de AICV; é reconhecido pela comunidade científica?	Sim		Sim		Sim	
2.2	Transparência e acessibilidade	Alta		Moderada		Alta	
2.2.1	Clareza das equações	Sim		Não		Sim	
2.2.2	Clareza das variáveis	Sim		Sim		Sim	
2.2.3	Modelo matemático de transporte	Sim		Não		Sim	
2.2.4	Representa as reações não-lineares	Sim		Sim		Sim	
Critério 3 - FC nacionais		NA	O modelo não apresenta FC para o Brasil.	NA	O modelo não apresenta FC para o Brasil.	Baixa/Moderada	Possui PFOH e PFOE para o Brasil, porém considera o país como um todo.
3.1	Possui FC para o Brasil	Não		Não		Sim	
3.1.1	Diferenciação espacial	-		-		1°x1°	
3.1.2	FC adequado	-		-		Não	

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Tabela 16 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização para danos aos ecossistemas

Critérios		Níveis de classificação	Observações	Níveis de classificação	Observações
		Van Zelm et al. (2016)		Van Goethem et al. (2013)	
Critério 1 - Escopo		Moderada	O modelo apresenta FC para NO _x , COVNM e para 165 substâncias individuais, porém com uma resolução considerada moderada. Modelo adaptado de Van Goethem et al. (2013).	Alta	O modelo apresenta FC para NO _x e COVNM.
1.1	Abrangência do escopo de aplicação	Global		Europa	
1.1.1	Nível de diferenciação espacial	1°x1°		0,5°x0,5°	
1.1.1.1	Resolução espacial representa formação e dispersão do <i>smog</i>	Moderada		Alta	
1.1.2a	Nível de fluxos elementares na fonte (artigo)	2		2 ^a	
1.1.2b	Nível de fluxos elementares no <i>software</i>	167		0 ^b	
1.2	Mecanismo ambiental do modelo	<i>endpoint</i>		<i>Endpoint</i>	
Critério 2 - Robustez Científica		Alta	O modelo é utilizado pelo método ReCiPe 2016, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.	Alta	O modelo não é utilizado por um método de AICV, mas é reconhecido pela comunidade científica, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.
2.1	Faz parte de um método de AICV; é reconhecido pela comunidade científica?	Sim		Sim	
2.2	Transparência e acessibilidade	Alta		Alta	
2.2.1	Clareza das equações	Sim		Sim	
2.2.2	Clareza das variáveis	Sim		Sim	
2.2.3	Modelo matemático de transporte	Sim		Sim	
2.2.4	Representa as reações não-lineares	Sim		Sim	
Critério 3 - FC nacionais		Baixa/Moderada	Possui FC para danos aos ecossistemas para o Brasil, porém considera o país como um todo.	NA	O modelo não apresenta FC para o Brasil.
3.1	Possui FC para o Brasil	Sim		Não	
3.1.1	Diferenciação espacial	1°x1°		-	
3.1.2	FC adequado	Não		-	

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Notas: ^aO nível de fluxos elementares não interferiu diretamente no cálculo da nota do critério 1, pois apesar do modelo apresentar 2 FC este número pode ser extrapolado, como em Van Zelm et al. (2008; 2013) e Van Zelm et al. (2016). ^bO modelo não está disponível em *softwares* de ACV, como SimaPro e OpenLCA.

Tabela 17 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização para danos à saúde humana (Continua)

Critérios		Níveis de classificação	Observações	Níveis de classificação	Observações
		Van Zelm et al. (2008; 2013)		Van Zelm et al. (2016)	
Critério 1 - Escopo		Alta	O modelo apresenta FC para e NO _x , COVNM e o PCOF para 135 COVNM individuais.	Moderada	O modelo apresenta FC para NO _x , COVNM e para 165 substâncias individuais, porém com uma resolução considerada moderada.
1.1	Abrangência do escopo de aplicação	Europa		Global	
1.1.1	Nível de diferenciação espacial	0,25°x0,25°		1°x1°	
1.1.1.1	Resolução espacial representa formação e dispersão do <i>smog</i>	Alta		Moderada	
1.1.2a	Nível de fluxos elementares na fonte (artigo)	2		2	
1.1.2b	Nível de fluxos elementares no <i>software</i>	137		167	
1.2	Mecanismo ambiental do modelo	<i>Endpoint</i>		<i>Endpoint</i>	
Critério 2 - Robustez Científica		Alta	O modelo é utilizado pelo método ReCiPe 2008, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.	Alta	O modelo é utilizado pelo método ReCiPe 2016, apresenta transparência e acessibilidade dos dados.
2.1	Faz parte de um método de AICV; é reconhecido pela comunidade científica?	Sim		Sim	
2.2	Transparência e acessibilidade	Alta		Alta	
2.2.1	Clareza das equações	Sim		Sim	
2.2.2	Clareza das variáveis	Sim		Sim	
2.2.3	Modelo matemático de transporte	Sim		Sim	
2.2.4	Representa as reações não-lineares	Sim		Sim	
Critério 3 - FC nacionais		NA	O modelo não apresenta FC para o Brasil.	Baixa/Moderada	Possui FC para danos à saúde humana para o Brasil, porém considera o país como um todo.
3.1	Possui FC para o Brasil	Não		Sim	
3.1.1	Diferenciação espacial	-		1°x1°	
3.1.2	FC adequado	-		Não	

Tabela 17 - Tabela de critérios com a avaliação dos modelos de caracterização para danos à saúde humana (Conclusão)

Critérios		Níveis de classificação	Observações
		Krewitt et al. (2011)	
Critério 1 - Escopo		Alta	O modelo apresenta Fatores de Danos, para impactos na saúde humana e em ambientes artificiais, devido à emissão de NO _x e COVNM.
1.1	Abrangência do escopo de aplicação	EU-15	
1.1.1	Nível de diferenciação espacial	0,5°x0,5°	
1.1.1.1	Resolução espacial representa formação e dispersão do <i>smog</i>	Alta	
1.1.2 ^a	Nível de fluxos elementares na fonte (artigo)	2	
1.1.2b	Nível de fluxos elementares no <i>software</i>	0 ^a	
1.2	Mecanismo ambiental do modelo	<i>endpoint</i>	O modelo é utilizado pelo método EcoSense, apresenta uma base científica confiável, porém, as equações, os modelos matemáticos utilizados e as variáveis não são claras e não são de fácil acesso.
Critério 2 - Robustez Científica		Baixa/Moderada	
2.1	Faz parte de um método de AICV; é reconhecido pela comunidade científica?	Sim	
2.2	Transparência e acessibilidade	Baixa	
2.2.1	Clareza das equações	Não	
2.2.2	Clareza das variáveis	Não	
2.2.3	Modelo matemático de transporte	Sim	
2.2.4	Representa as reações não-lineares	Sim	
Critério 3 - FC nacionais		NA	O modelo não apresenta FC para o Brasil.
3.1	Possui FC para o Brasil	Não	
3.1.1	Diferenciação espacial	-	
3.1.2	FC adequado	-	

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Notas: ^aO modelo não está disponível em *softwares* de ACV, como SimaPro e OpenLCA

Cada modelo apresenta o cálculo do FC para diferentes categorias de impacto ambiental dentro da cadeia de impacto do *smog* fotoquímico logo, a comparação direta não é a mais adequada. Assim, a comparação entre os modelos foi realizada com base no impacto ambiental avaliado e, para isso, os modelos foram divididos em 3 (três) grupos de comparação: 1) modelos que calculam o PCOF (Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímicos) ou o PFO (Potencial de Formação de Oxidantes); 2) modelos que apresentam FC para danos aos ecossistemas; 3) modelos que apresentam FC para danos à saúde humana.

1) Modelos que calculam PCOF ou PFO:

O modelo de caracterização descrito em Van Zelm et al. (2008; 2013) calcula o Potencial de Formação de Oxidantes (PFO) para 137 fluxos elementares (substâncias) precursores do *smog* fotoquímico, ou seja, resultados em nível *midpoint* para o aumento da concentração de ozônio troposférico na Europa. A resolução do modelo ($0,25^{\circ} \times 0,25^{\circ}$) representa a formação e dispersão dos oxidantes. O modelo é utilizado pelo método de AICV ReCiPe 2008 e é reconhecido pela comunidade científica. A descrição do modelo apresenta transparência e acessibilidade das fórmulas, dos dados e das variáveis utilizadas. Por estes motivos, o modelo foi considerado com conformidade alta para os critérios escopo e robustez científica, e não se aplica para o critério FC nacional.

O modelo de caracterização elaborado por Derwent et al. (1996; 1998); Jenkin e Hayman (1999), calcula o Potencial de Criação de Oxidantes Fotoquímicos (PCOF) para 120 COVs, para os NO_x , o CO, o SO_2 individuais. Faz uso do Mecanismo Químico Principal (MQP), que é baseado em diversos estudos publicados e reconhecidos pela comunidade científica, apresentando resultados confiáveis. Apresenta uma resolução de $0,5^{\circ} \times 0,5^{\circ}$ nas regiões de interesse e de $0,1^{\circ} \times 0,1^{\circ}$ no Reino Unido, representando bem a formação do *smog* fotoquímico sobre a Europa.

O modelo de Derwent et al. (1996;1998); Jenkin e Hayman (1999), é utilizado pelo método de AICV CML-IA *baseline* e é reconhecido pela comunidade científica. Porém, não deixa claro todas as fórmulas, todos os cálculos e todas as variáveis utilizadas nos cálculos do PCOF e nem como o MQP foi calculado ou obtido (estudos mais aprofundados devem ser realizados). Alguns parâmetros obtidos em câmeras de *smog* (experimentos) podem dificultar o entendimento para reprodutibilidade do FC. O modelo CML-IA *baseline*, apresenta em seu inventário, o PCOF de 131 fluxos elementares (substâncias) precursores do *smog* fotoquímico, não incluindo NO_x e COVNM. Com base nestas informações, o modelo apresentou

conformidade alta com relação ao critério escopo, moderada com relação ao critério robustez científica e não se aplica para o critério FC nacional.

O modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta uma extensão do PFOE e do PFOH, em escala global, para 167 fluxos elementares (substâncias) precursores do *smog* fotoquímico, as quais estão presentes nos apêndices de Huijbregts et al. (2016; 2017); valores prontos para serem utilizados dentro do método global ReCiPe 2016 - Global. A resolução do modelo ($1^\circ \times 1^\circ$) é considerada moderada, pois pode subestimar a formação de *smog* fotoquímico. O modelo apresenta transparência e acessibilidade dos dados, as variáveis são claras e o modelo matemático utilizado (TM5-FASST) está acessível na literatura. O modelo descrito por Van Zelm et al. (2016) apresenta PFOH e PFOE para o Brasil e uma média ponderada para o mundo (escala global). Para o Brasil, o modelo apresenta PFOH e PFOE somente para NO_x e COVNM e em escala global para 167 substâncias individuais. Logo, a conformidade com relação ao escopo foi considerada moderada, alta com relação ao critério robustez científica, e o terceiro critério foi considerado com conformidade baixa/moderada.

2) Modelos que apresentam FC para danos aos ecossistemas naturais:

O modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2016) apresenta FC (*endpoint*) em escala global, para danos aos ecossistemas devido à emissão de NO_x e COVNM. O número de fluxos elementares pode ser ampliado por meio de um fator de conversão para 167 fluxos elementares, segundo Huijbregts et al. (2016; 2017). O modelo faz uso de uma resolução baixa ($1^\circ \times 1^\circ$), que pode subestimar a formação de *smog* fotoquímico em algumas regiões. Apresenta transparência e acessibilidade dos dados, as variáveis são claras e o modelo de transporte químico utilizado (TM5-FASST) está acessível na literatura e representa a formação do *smog* fotoquímico. O modelo faz parte do método global ReCiPe 2016, apresenta resultados semelhantes aos trabalhos de Hauschild et al. (2006) e Van Goethem et al. (2013a), demonstrando confiabilidade nos dados. Com base nestas informações, o escopo foi considerado com conformidade moderada e a robustez científica com conformidade alta.

Van Zelm et al. (2016) apresenta um FC para danos aos ecossistemas para o Brasil, somente para os fluxos elementares NO_x e COVNM. Porém, não se pode dizer que é apropriado para a realidade brasileira, pois um mesmo FC é considerado para as diferentes regiões do país e a resolução utilizada é baixa ($1^\circ \times 1^\circ$). Sabe-se somente que foram considerados os meses de produção vegetal para o hemisfério sul, e que os valores correspondentes da "concentração limiar de AOT40 por unidade de emissão anual" por região, foram multiplicados pela correspondente área natural de pastagem ou floresta por região, com base no banco de dados

Global Land Cover 2000 (BARTHOLOMÉ e BELWARD, 2005). Assim, foi considerada uma conformidade moderada/baixa com relação ao terceiro critério (FC nacional).

O modelo de caracterização descrito por Van Goethem et al. (2013a,b) apresenta um FC para danos ao ecossistema devido à emissão de NO_x e COVNM para 65 regiões da Europa. Considera a exposição AOT40 acima do nível do solo de 1m (um metro) para pastagem e 3m (três metros) para árvores, levando em conta os meses de maior produção vegetativa. O modelo apresenta transparência e acessibilidade dos dados, as variáveis são claras e o modelo de transporte químico utilizado (EMEP) está acessível na literatura, a resolução ($0,5^\circ \times 0,5^\circ$) é considerada boa, representando a formação do *smog* fotoquímico e a exposição da vegetação ao ozônio. O modelo não se apresenta em nenhum método de ACV, porém é reconhecido pela comunidade científica e apresenta resultados semelhantes a modelos reconhecidos pela comunidade científica (VAN LOON et al., 2007 e VAUTARD et al., 2007). Apresenta conformidade alta com relação aos critérios escopo e robustez científica, e não se aplica ao critério FC nacional.

O modelo de Van Zelm et al. (2016) para danos aos ecossistemas foi baseado em Van Goethem et al. (2013a,b). Os cálculos utilizados por ambos são semelhantes, porém Van Zelm et al. (2016) fez uma adaptação do modelo, substituindo o modelo de transporte químico europeu (EMEP) pelo modelo de transporte químico mundial (TM5-FASST) e os parâmetros europeus por parâmetros que representem cada uma das 56 regiões – AOT40, FPA e Área. Indicando que os modelos de caracterização podem ser regionalizados, desde que exista um modelo de transporte químico que represente a formação e dispersão do *smog* fotoquímico na região de interesse, como também existam parâmetros secundários regionais (AOT40, FPA, Área, etc.).

3) Modelos que apresentam FC para danos à saúde humana:

O modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2008; 2013) apresenta FC para a categoria de impacto danos à saúde humana, causados pela exposição ao ozônio, formado devido à emissão de NO_x e COVNM. Como também, FC para o PCOF para COVNM individuais, ou seja, resultados em nível *endpoint* para 137 fluxos elementares, para emissões em toda a Europa são tomadas como ponto de partida. O modelo faz parte do método de AICV ReCiPe 2008 e possui uma base científica confiável, onde há transparência e acessibilidade dos dados. O modelo matemático utilizado (LOTOS-EUROS) é de fácil acesso e com resolução considerada adequada ($0,25^\circ \times 0,25^\circ$), representando a formação de *smog* fotoquímico sobre a

Europa. Com relação a estas informações, os critérios escopo e robustez científica obtiveram uma conformidade alta e não se aplica para o critério FC nacional.

Van Zelm et al. (2016) desenvolveram FC (*endpoint*) em escala global, para danos à saúde humana devido à emissão de NO_x e COVNM, o número de fluxos elementares pode ser ampliado por meio de um fator de conversão (de *midpoint* para *endpoint*) para 167 fluxos elementares, segundo Huijbregts et al. (2016; 2017). Van Zelm et al. (2016) comentam que em escala regional, a resolução utilizada (1°x1°) pode subestimar a formação de *smog* fotoquímico, porém com relação à escala global, esta resolução pode ser considerada boa, devido à necessidade de recurso computacional. O modelo apresenta transparência e acessibilidade dos dados, as variáveis são claras e o modelo matemático utilizado (TM5-FASST) está acessível na literatura e representa a formação do *smog* fotoquímico. Porém, foi ajustado somente para a população ≥30 anos de idade do ano de 2005 (ONU, 2011), assumindo que não há efeitos em pessoas mais jovens, contudo qualquer cidadão está predisposto aos efeitos dos oxidantes (EC-JRC, 2010). O modelo faz parte do método global ReCiPe 2016, e apresenta resultados semelhantes à modelos reconhecidos pela comunidade científica (TANG et al., 2016 e VAN ZELM et al., 2008). Devido a estas informações, a conformidade com relação ao escopo foi considerada moderada e alta com relação ao critério robustez científica.

O modelo descrito por Van Zelm et al. (2016) apresenta um FC para danos à saúde humana para o Brasil e uma ponderação para o mundo. Porém, com pontos fracos: resolução baixa (1°x1°); considera que apenas pessoas com idade ≥30 anos sofrem influências negativas da ação do ozônio; o modelo de transporte químico utilizado (TM5-FASST) não leva em consideração a diferença entre os arquétipos (áreas urbanas, rurais ou remotas) no cálculo do FI, apresentando um FC único para todo o país; para o Brasil apresenta FC somente para NO_x e COVNM. Em contrapartida, o modelo considera parâmetros nacionais como: a taxa de mortalidade; a concentração pré-existente dos precursores; o número de pessoas ≥ 30 anos de idade; e o valor dos anos de vida perdidos por caso. Logo, o terceiro critério foi considerado com conformidade moderada/baixa.

O modelo descrito em Krewitt et al. (2001) apresenta fatores de danos para impactos à saúde humana e em ambientes artificiais devido à emissão de NO_x e COVNM. É um modelo utilizado pelo método de AICV EcoSense, que faz uso de modelos matemáticos para configurar a formação do *smog* fotoquímico, os quais apresentam uma resolução adequada. Porém, estes modelos e os cálculos utilizados para obter os resultados finais, não são de fácil acesso e não estão expressos de forma clara. Apesar de possuir uma base científica confiável, o modelo apresenta muitas limitações, ou seja, há uma grande dificuldade de se modificar os parâmetros

de entrada. Com isso, a conformidade do critério escopo foi considerada alta, porém o critério robustez científica foi considerado com conformidade moderada/baixa e não se aplica ao terceiro critério.

4.2.2.1 Pontuação final das tabelas de critérios

A partir dos resultados das Tabelas 15, 16 e 17, desenvolveu-se a Tabela 18 com a pontuação final obtida pela avaliação dos critérios, para cada modelo de caracterização.

Tabela 18 - Pontuação final dos modelos de caracterização estudados

Modelo de caracterização	Critério			Pontuação
	1	2	3	
Van Zelm et al. (2008; 2013) – PFO	3	3	0	6
Derwent et al. (1996;1998); Jenkin e Hayman (1999) – PCOF	3	2	0	5
Van Zelm et al. (2016) – PFOE e PFOH	2	3	1,5	6,5
Van Zelm et al. (2016) – danos aos ecossistemas	2	3	1,5	6,5
Van Goethem et al. (2013) – danos aos ecossistemas	3	3	0	6
Van Zelm et al. (2008; 2013) – danos à saúde humana	3	3	0	6
Van Zelm et al. (2016) – danos à saúde humana	2	3	1,5	6,5
Krewitt et al. (2011) – danos à saúde humana	3	1,5	0	4,5

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Os resultados da Tabela 18 sugerem o modelo de caracterização de Van Zelm et al. (2016), para danos à saúde humana, danos aos ecossistemas, PFOE e PFOH, como uma boa opção para ser utilizado em estudos de ACV no Brasil, pois, é o modelo que apresenta maior nota referente aos critérios. Além disso, entre os modelos presentes neste estudo, é o único que apresenta FC (*midpoint* e *endpoint*) em nível global (para 167 fluxos elementares/substâncias), como também FC para o Brasil (para 2 fluxos elementares/substâncias).

Contudo, os resultados não descartam a necessidade de estudos de regionalização direcionados à realidade brasileira, para o desenvolvimento de um modelo de caracterização de AICV para a categoria de impacto *smog* fotoquímico. Dentre as razões para isso, se deve ao modelo Van Zelm et al. (2016) apresentar algumas desvantagens como: considerar apenas um FC para todo Brasil; a resolução do modelo (1°x1°) pode subestimar a formação do *smog* fototquímico; o modelo considera que apenas pessoas com idade ≥ 30 anos sofrem influências negativas da ação do ozônio; o modelo de transporte químico utilizado (TM5-FASST) não leva em consideração a diferença entre os arquétipos (áreas urbanas, rurais ou remotas) no cálculo do FI; e apresenta FC somente para NO_x e COVNM.

4.2.2.2 Análise específica dos modelos Van Zelm et al. (2008; 2016)

Diversos modelos de caracterização de AICV foram desenvolvidos nos últimos 20 anos, para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, porém estes modelos possuem diferenças entre si. Dentre estes, observa-se que os cálculos do FC *endpoint* utilizados por Van Zelm et al. (2008) e Van Zelm et al. (2016) são semelhantes e compatíveis com a metodologia de cálculos sugerida por Preiss (2015), o qual sugere uma forma de cálculo padrão para a determinação dos FC regionalizados para o fenômeno *smog* fotoquímico.

Preiss (2015) sugere que o cálculo do Fator de Caracterização pode ser expresso como o produto de três fatores, como segue na equação (32):

$$FC_{s,a,p,i} = \sum_i (FI_{i,p,s,a} \times \sum_e (FE_{i,d} \times FDa_d)) \quad (32)$$

Onde: FC é o fator de caracterização; *s* é a região de origem; *a* é uma certa característica arquetípica; *p* é o poluente emitido (NO_x ou COVNM); *i* é o poluente formado (ozônio); FI é o fator de inalação; *p* é a população atingida em cada *grid-cell*; FE é o fator de efeito; FDa é o fator de dano; e *d* é a doença causada pela exposição. A Figura 6 apresenta o modelo pelo qual foram derivados os fatores de caracterização dos impactos à saúde humana causados pelo ozônio, segundo Preiss et al. (2012).

Figura 6 - Modelo para derivar FC dos impactos à saúde humana causados pelo *smog* fotoquímico

Fatores a considerar	Saída metric intermediária e final	Fatores ambiental e fisiológico		
Pais de origem, altura da emissão: NO _x e COVNM	Emissões pro ar (kg/ano)		Fator de Inalação (kg _{in} /kg _{em})	Fator de Caracterização (DALY/kg _{em})
		Destino (Modelo de transporte químico)		
Concentração pré-existente química e meteorológica: emissões, concentrações, etc.	Concentração no ar ambiente (µg/m³)			
		Exposição		
Exposição, densidade populacional, taxa de respiração	Inalação (kg/ano)		Fator de Efeito e Dano (DALY/kg _{in})	
		Dose resposta (baseado em CRF – casos por kg inalado)		
Funções de concentração resposta (CRF) (estudos epidemiológicos)	Incidência da doença (casos/ano/kg)			
		Severidade - DALY por caso		
	Danos na saúde humana (YOLL/ano) e (DALY/ano)			

Fonte: Adaptada de Preiss (2015), apud Preiss et al. (2012).

A forma de calcular o FI dos modelos (VAN ZELM et al., 2008; VAN ZELM et al., 2016) é muito semelhante com a sugerida por e por Preiss (2015). Todos os modelos, consideram a quantidade de oxidante fotoquímico na *grid-cell* (g.m⁻³) relacionado com a massa do poluente emitido (NO_x ou COVNM) (g.dia⁻¹), como pode ser observado na Tabela 19. Cabe ressaltar que este é um fator adimensional, pois representa uma fração absorvida por um poluente emitido.

Tabela 19 - Diferenças entre os cálculos do fator de inalação

Van Zelm et al. (2008)		Van Zelm et al. (2016)		Preiss (2015)	
$FI_{pop,x,i} = \frac{dI_{pop,k,i}}{dM_x} = (IH \times N_i) \frac{dC_{k,i}}{dM_x}$		$FI_{k,x,i \rightarrow j} = \frac{dC_{k,j} \times N_j \times BR}{dM_{x,i}}$		$FI_{x,i} = \sum_{n=1}^n \left(\frac{dC_{i,g}}{dEm_p} (BR \times N_g) \right)$	
IH	Taxa de respiração média (m ³ .ano ⁻¹)	BR	Taxa de Respiração média (m ³ .ano ⁻¹)	BR	Taxa de respiração média (m ³ .ano ⁻¹)
N _i	Número de habitantes na <i>grid-cell i</i>	N _i	Número de habitantes na <i>grid-cell i</i>	N _i	Número de habitantes na <i>grid-cell i</i>
dI	Aumento marginal na taxa de inalação do poluente k				
dC	Concentração média anual do poluente k (kg.m ⁻³)	dC	Mudança na concentração do poluente k (kg.m ⁻³)	dC	Mudança na concentração do poluente k (g.m ⁻³)
dM	Aumento marginal na emissão do precursor x	dM	Aumento marginal na emissão do precursor x	dEm	Aumento emissão do precursor p (g.dia ⁻¹)

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

O cálculo do FE também é semelhante em todos os casos, porém em Van Zelm et al. (2008) e Van Zelm et al. (2016), os cálculos apresentam-se mais detalhados (Tabela 20). As diferenças ocorrem porque os modelos utilizam formas de cálculo diferentes um do outro (M6M e 8h de concentração máxima diária, respectivamente), mudando alguns fatores na fórmula (como observa-se na descrição destes modelos no item 4.1.1). Contudo, consideram que o FE_{e,k,i} (kg⁻¹) liga mudanças marginais na inalação (dI_{pop,k,i}) com mudanças marginais da carga/fardo atribuível (AB) de uma população em contrair a doença *e*, devido à exposição ao poluente *k* por um ano de exposição (AB_{e,k} ano⁻¹).

Tabela 20 - Diferenças entre os cálculos do fator de efeito

Van Zelm et al. (2008)		Van Zelm et al. (2016)		Preiss (2015)	
$FE_{e,k,i} = \frac{dAB_{e,k,i}}{dI_{k,i}}$ $FE_{e,k,i} = \frac{(RR_{e,k} - 1) \times F_{inc,e}}{IH \times ((RR_{e,k} - 1) \times C_{k,i} + 1)^2}$		$FE_{e,k,j} = \frac{(RR_{e,k} - 1) \times MR_{e,j}}{BR \times ((RR_{e,k} - 1) \times C_{k,j} + 1)}$		$FE_{e,k,i} = \frac{dAB_{e,k,i}}{dI_{k,i}}$	
IH	Taxa de respiração média (m ³ .ano ⁻¹)	BR	Taxa de respiração média (m ³ .ano ⁻¹)	BR	Taxa de respiração média (m ³ .ano ⁻¹)
RR	Risco relativo de obter uma doença <i>e</i> por um poluente <i>k</i> (por µg.m ⁻³)	RR	Risco relativo de se obter um efeito na saúde <i>e</i> devido a exposição à um poluente <i>k</i> (por µg.m ⁻³)	dAB	Fardo/carga atribuível (ex. dias perdidos)
C	Concentração do poluente <i>k</i> emitido (kg.m ⁻³)	C	Média anual da concentração pré-existente do poluente <i>k</i> em uma região (µg.m ⁻³)	dI	Inalação dentro de 1 ano (g.ano ⁻¹)
F	Taxa de incidência de uma população de pegar uma doença <i>e</i> por ano de exposição (ano ⁻¹)	MR	Taxa de mortalidade respiratória por efeito na saúde <i>e</i> em uma região <i>j</i> (morte/pessoa/ano)		

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Para o cálculo do FDa, em contrapartida, todos os modelos apresentam diferenças na forma de cálculo, presentes na Tabela 21. Van Zelm et al. (2016) apresenta este cálculo de forma mais simples. O modelo descrito por Van Zelm et al. (2008) e a sugestão apresentada por Preiss (2015) apresentam-se mais detalhadas e ambos consideram que o FDa_{e,k}, (ano) liga as mudanças marginais na carga/fardo atribuível (AB) com mudanças marginais em DALY (dDALY_d/dAB_d).

Tabela 21 - Diferenças entre os cálculos do fator de dano

Van Zelm et al. (2008)		Van Zelm et al. (2016)		Preiss (2015)	
$FDa_{e,k} = \frac{dDALY_{e,k,i}}{dAB_{e,k,i}} = YLL_e + D_e \cdot S_e$		$FDa_{e,k,j} = \frac{dYLL_{e,k,j}}{dINC_{e,k,j}}$		$FDa_{e,k} = \frac{dDALY_{e,k,i}}{dAB_{e,k,i}}$	
YLL	Anos de Vida Perdidos	YLL	Anos de Vida Perdido	DALY	Anos de Vida Ajustados por Incapacidade
D _e	Duração da doença e	INC	Caso de Incidência	AB	Mudanças marginais na carga atribuível
S _e	Severidade da doença e				

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Preiss (2015) descreve DALY (do inglês *Disability Adjusted Life Years*) como a soma entre os anos equivalentes perdidos devido à morbidade (YLD - do inglês, *Years equivalents*

lost due to morbidity) e os anos de vida perdidos devido morte prematura (YOLL - do inglês, *Years Of Lifetime Lost due to premature death*), descritos na equação (33):

$$DALY = YLD + YOLL = \sum_{i=1}^n ND_d \times DW_d \times L_d + \sum_{i=1}^n NM_d \times T_d \quad (33)$$

onde: ND_d é o número de doenças d que ocorreram em um período de 1 (um) ano; DW_d é o peso da incapacidade causada pela doença d ; L_d é a duração da doença d (em anos ou fração de anos); NM_d é o número de óbitos causados pela doença d ; T_d é a expectativa média de vida menos a idade no momento da morte.

4.2.3 Fatores que influenciam nos cálculos do FC

Praticantes de ACV podem escolher entre diferentes métodos/modelos de caracterização de AICV, para diferentes categorias de impacto, contudo, há grandes diferenças entre os métodos encontrados na literatura. Com isso, dois problemas surgem: (1) diferentes métodos de AICV resultam em diferentes resultados para o mesmo estudo de caso e; (2) as incertezas nos resultados encontrados são altas (RENOU et al., 2008).

Os modelos de caracterização para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, presentes neste estudo, apresentam diferenças entre eles. As quais, são referentes a diversos fatores que influenciam no cálculo dos FC finais, tais como:

1. Parâmetros de entrada do modelo:

- a) Parâmetros de cálculo: período/tempo de avaliação do impacto utilizados nos cálculos, por exemplo, concentração máxima de ozônio de 8h diárias, 24h diárias, 5 dias consecutivos ou M6M (máxima média móvel ao longo de 6 meses, levando em consideração 1 hora de concentração máxima diária), etc.;
- b) Áreas de impacto consideradas nos cálculos (ex.: incluindo ou excluindo emissões e/ou impactos oriundos das *grids* externas à região considerada pelo modelo, etc.);
- c) Dados de entrada utilizados nos cálculos do FC (concentrações pré-existentes, dados meteorológicos, número da população, etc.), os quais podem variar conforme a escala utilizada pelo modelo (regionais, continentais ou globais);
- d) Modelo de transporte químico utilizado, diferentes modelos apresentam resoluções diferentes e são calibrados para regiões específicas;

- e) Arquétipos considerados, ou não, pelo modelo de transporte químico (áreas urbanas, rurais ou remotas);
 - f) Fontes de emissões e as suas respectivas alturas, consideradas ou não, pelo modelo, ou seja, a diferenciação entre emissões de precursores oriundos de fontes industriais e veiculares.
2. Parâmetros de saída do modelo:
- a) Escala/ abrangência utilizada pelo modelo: regional, continental ou global;
 - b) Fluxos elementares (substâncias) consideradas pelo modelo, pois diversas substâncias contribuem para a formação do fenômeno *smog* fotoquímico, e conforme observou-se, cada modelo considera uma quantidade e qualidade de substâncias diferentes.
3. Parâmetros relacionados à ACV:
- a) Categoria de impacto ambiental, considerada dentro da cadeia de impacto ambiental (*midpoint*, mais ou menos específica e/ou *endpoint*, danos à saúde humana, danos aos ecossistemas, etc.);
 - b) Padrão de medida, ou seja, as unidades utilizadas para se calcular o FC (exemplo: DALY, ano.kton⁻¹, etc.).

Estes fatores podem apresentar resultados diferentes para um mesmo estudo. Assim, cuidados com a forma de calcular o FC devem ser tomados para que não ocorra subestimação ou superestimação dos FC. O que pode levar à interpretações equivocadas em estudos de ACV.

Van Zelm et al. (2016) ressalta que para pesquisas futuras, seria de grande importância o uso de um modelo de transporte químico global, que consiga diferenciar os FC a respeito da altura das fontes emissoras (nível do solo, altura baixa e alta) e localização das emissões. Bem como, obter FI específicos para diferentes arquétipos (para o *smog* fotoquímico: áreas urbanas, rurais ou remotas), além de uma resolução de grade maior, o que aumentaria a precisão dos resultados. Contudo, todos estes adicionais, aumentariam a quantidade de dados de entrada e, conseqüentemente, a demanda por recursos computacionais.

4.3 ESTUDO DE CASO: COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE CARACTERIZAÇÃO PARA A CATEGORIA DE IMPACTO SMOG FOTOQUÍMICO: uma avaliação no transporte de açúcar no Brasil

Dos 5 (cinco) modelos de caracterização estudados, foi possível obter resultados para 14 (quatorze) categorias de impacto diferentes, relacionadas à categoria de impacto *smog* fotoquímico, quais sejam: o modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013) que apresenta resultados para 2 (duas) categorias de impacto; o modelo de Van Zelm et al. (2016) que apresenta resultados para 8 (oito) categorias de impacto; o modelo de Krewitt et al. (2001) para 2 (duas) categorias de impacto; e os modelos de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999) e de Van Goethem et al. (2013a) apresentam 1 (uma) categoria de impacto cada. Os modelos de caracterização apresentam unidades de referência final diferentes, o que faz com que não sejam comparáveis diretamente. Assim, através de uma porcentagem relativa dos cenários estudados os modelos podem ser comparados, bem como os trajetos (procedimento também conhecido por normalização interna dos resultados). A Tabela 22 apresenta o impacto percentual de cada trajeto, para cada categoria de impacto dos modelos de caracterização estudados.

Tabela 22 - Resultados dos trajetos por modelo de caracterização

Modelo	Escala	Nível	Rodovia	Ferrovias	Unidade
Van Zelm et al. (2016)	Global	PFOH – <i>midpoint</i>	97,6%	100,0%	kg NO _x -eq.
		PFOE – <i>midpoint</i>	98,1%	100,0%	kg NO _x -eq.
		Danos aos ecossistemas	98,1%	100,0%	espécie.ano
		Danos à saúde humana	97,6%	100,0%	Ano
Van Zelm et al. (2016)	Brasil	PFOH – <i>midpoint</i>	96,8%	100,0%	kg NO _x -eq.
		PFOE – <i>midpoint</i>	96,9%	100,0%	kg NO _x -eq.
		Danos aos ecossistemas	96,8%	100,0%	km ² .ano
		Danos à saúde humana	96,8%	100,0%	Ano
Van Zelm et al. (2008 2013)	Europa	PFO – <i>midpoint</i>	100,0%	98,9%	kg COVNM-eq.
		Danos à saúde humana	100,0%	98,9%	DALY
Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999)	Europa	PCOF – <i>midpoint</i>	100,0%	88,4%	kg C ₂ H ₄ -eq.
Van Goethem et al. (2013a)	Europa	Danos aos ecossistemas	98,0%	100,0%	m ² .ano
Krewitt et al. (2001)	EU-15	Danos à saúde humana	100,0%	74,1%	YOLL
		Danos às plantações	100,0%	96,4%	EURO

Fonte: Elaborada pela autora (2017).

Como observa-se na Tabela 22, os modelos de caracterização apresentam diferenças nos resultados para o mesmo estudo de caso. Isso acontece, pois, os modelos encontrados na

literatura são diferentes uns dos outros (RENOU et al., 2008). Principalmente com relação ao nível de fluxos elementares presentes nos cálculos do FC e quantos destes foram considerados pelo estudo de caso; à região de referência; à categoria de impacto (nível de avaliação) dos modelos e à unidade de referência final.

O modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta 8 (oito) categorias de impacto diferentes, 4 (quatro) em nível *midpoint* e 4 (quatro) em nível *endpoint*, para as escalas global e Brasil. Todas as categorias de impacto deste modelo demonstraram que o trajeto ferroviário apresenta, em média, um potencial de formação de *smog* 2,6% maior que o trajeto rodoviário.

Para a escala global, o modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta FC para 167 fluxos elementares, destes apenas 42 contribuíram para a formação de *smog* deste estudo de caso, cujos fluxos elementares que mais contribuíram para os danos aos ecossistemas e para o PFOE foram: NO_x (95,8%), COVNM (3,9%), Pentano (0,1%) e Butano (0,03%). Com relação aos danos à saúde humana e PFOH, os fluxos elementares de maior impacto foram: NO_x (97,3%), COVNM (2,4%), Pentano (0,04%) e Butano (0,02%). Para a escala Brasil, o modelo apresenta FC para 2 (dois) fluxos elementares (NO_x e COVNM), destes, o NO_x contribuiu de 98,9% a 99,4% do impacto. Já o COVNM teve uma contribuição em torno de 0,6% a 1,1% do potencial de formação de *smog*, para todas as categorias de impacto (*midpoint* e *endpoint*).

O modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013) apresenta 2 (duas) categorias de impacto (*midpoint* e *endpoint*) para o ambiente Europeu. Ambas as categorias de impacto apresentaram o trajeto rodoviário com um potencial de formação de *smog* 1,1% maior que o ferroviário. Para ambas as categorias de impacto, o modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013) apresenta FC para 137 fluxos elementares, sendo que 61 destes contribuíram para a formação de *smog* neste estudo de caso. Os 4 (quatro) fluxos elementares de maior percentual de contribuição para o impacto *smog* foram: NO_x (84,49%), COVNM (11,92%), monóxido de carbono fóssil (1,37%) e dióxido de enxofre (1,30%). Os demais fluxos elementares apresentaram uma contribuição de impacto inferior a 0,20% cada.

No modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999), elaborado para o ambiente Europeu, o trajeto rodoviário teve um potencial de criação de oxidantes fotoquímico 11,6% maior que o trajeto ferroviário. O modelo apresenta o PCOF para 131 fluxos elementares, dos quais 54 contribuíram para o potencial de criação de *smog*, deste estudo.

Para o trajeto rodoviário, os 4 (quatro) fluxos elementares que mais contribuíram para a formação de impacto *smog* foram: monóxido de carbono fóssil (29,46%), dióxido de enxofre (38,85%), pentano (5,11%) e formaldeído (5,0%). Para o trajeto ferroviário, os 4 (quatro) fluxos

elementares que mais contribuíram para a formação de impacto *smog* foram: monóxido de carbono fóssil (48,09%), dióxido de enxofre (33,69%), metano fóssil (2,96%) e pentano (2,77%). Neste modelo, diferente dos demais, observa-se que os fluxos elementares contribuem de forma diferente para os trajetos. Observa-se também que este modelo não apresenta PCOF para NO_x e COVNM em seu inventário, fluxos elementares que apresentam grande contribuição para a formação do fenômeno *smog* fotoquímico, conforme observado em Van Zelm et al. (2008; 2013; 2016).

Em nível *midpoint*, o modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta resultados mais específicos na cadeia de impacto, ou seja, resultados direcionados para o potencial de formação de oxidantes para danos à saúde humana e danos aos ecossistemas (PFOH e PFOE), quando comparado aos demais modelos (em nível *midpoint*) presentes neste estudo – o modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013) e o modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999). Nestes modelos, a categoria de impacto em nível *midpoint* (PFO e PCOF), podem resultar em danos aos ecossistemas e danos à saúde humana, uma vez que é um resultado mais abrangente dentro da cadeia de impacto.

O modelo de Van Goethem et al. (2013a), elaborado para o ambiente Europeu, apresenta FC para a categoria de impacto danos aos ecossistemas (*endpoint*), devido à emissão de precursores do fenômeno *smog* fotoquímico. Os resultados do modelo demonstraram que o trajeto ferroviário apresentou um potencial de danos aos ecossistemas 2% maior que o rodoviário. O modelo apresenta FC para 2 (dois) fluxos elementares, destes o NO_x contribuiu com 95,89% do impacto; e o COVNM teve uma contribuição em torno de 4,11% do potencial de formação de *smog* que causa danos aos ecossistemas.

O modelo de Krewitt et al. (2001), elaborado para o ambiente Europeu, possui FC para danos à saúde humana e danos às plantações, causados pelo fenômeno *smog*, devido à emissão dos precursores NO_x e COVNM. Os resultados do modelo demonstraram que o trajeto rodoviário causou 25,9% mais danos à saúde humana e 3,6% mais danos às plantações comparando com o trajeto ferroviário. Este modelo apresenta FC para 2 (dois) fluxos elementares (NO_x e COVNM). Para os danos às plantações, ambos contribuíram para a formação de *smog* fotoquímico nos dois trajetos, o NO_x contribuiu em média com 81,49% do impacto; e o COVNM teve uma contribuição em torno de 18,51% do potencial de formação de *smog* que causa danos às plantações.

Para os danos à saúde humana, o modelo de Krewitt et al. (2001) possui FC para 2 (dois) fluxos elementares (NO_x e COVNM), contudo o fluxo elementar de NO_x apresenta-se negativo. Com relação a isso, Krewitt et al. (2001) destacam que não se deve interpretar os fatores

negativos de forma a dizer que emitir mais é benéfico ao meio ambiente. Portanto, em estudos de ACV, Krewitt et al. (2001) sugerem o uso de FC igual a zero, ao invés de fatores de danos negativos, indicando assim, que o potencial de danos ambientais é baixo em um contexto específico. Deste modo, o FC para danos à saúde humana devido à emissão de NO_x foi considerada como “zero”, e o fluxo elementar de COVNM apresentou 100% do potencial de formação de *smog* que contribuem para os danos à saúde humana.

De maneira geral, as análises demonstraram que, a diferença do potencial de formação do fenômeno *smog* entre os meios de transporte não são significativas. Sendo que, os modelos que apresentaram maior diferença de potencial de formação de *smog* foram: Krewitt et al. (2001) (danos à saúde humana) e Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999) - PCOF, para os quais o trajeto ferroviário demonstrou ser 25,9% e 11,6% (consecutivamente) menos impactante que o rodoviário. Com exceção destes modelos, os demais apresentam uma diferença média de 2,4% de potencial de impacto devido ao *smog* entre os dois trajetos.

Essas pequenas diferenças nos resultados dos modelos, com relação ao potencial de formação de *smog* fotoquímico, podem ser devido ao tipo de combustível, os fluxos elementares considerados na base de dados dos transportes presentes no *ecoinvent*, e os processos unitários que contribuem para o impacto dentro de cada modelo.

Ambos os meios de transportes usam o diesel como combustível, e ambas as bases de dados, apresentam emissões para o ar dos principais fluxos elementares precursores de *smog*. Sendo eles: NO_x , COVNM, monóxido de carbono, dióxido de carbono (ORLANDO et al., 2010; PREISS, 2015); dióxido de enxofre, metano (BRASSEUR, 1999, apud CHIQUETTO, 2008, p. 7-13); pentano, propano, buteno, xileno, benzeno, entre outros (ALVIM et al., 2014).

Os processos unitários que contribuíram para o impacto de cada meio de transporte, foram semelhantes entre os meios de transporte e os modelos de caracterização, no entanto tiveram pesos diferentes em cada modelo de caracterização. Para o transporte ferroviário, os 3 (três) processos unitários que mais contribuíram, pelo modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013), foram: o transporte pelo trem (85,9%); a construção da via férrea (6,1%); e o diesel utilizado pelo trem no transporte (4,9%). Pelo modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999), os 3 (três) processos unitários que mais contribuíram foram: o transporte pelo trem (36,6%); o diesel utilizado no transporte (24,6%); e a construção da via férrea (22,4%). Pelo modelo de Van Zelm et al. (2016) Global, foram: o transporte pelo trem (89,3%); a construção da via férrea (5,2%); e o diesel utilizado pelo trem no transporte (3,2%). Para o transporte rodoviário, os 3 (três) processos unitários que mais contribuíram, pelo modelo de Van Zelm et al. (2008; 2013),

foram: o transporte pelo caminhão (69,4%); a construção da estrada (19,2%); e o diesel utilizado pelo caminhão no trajeto (9,4%). Pelo modelo de Derwent et al. (1998); Jenkin e Hayman (1999) foram: o diesel utilizado pelo caminhão no trajeto (41,3%); o transporte pelo caminhão (24,9%); e a construção da estrada (24,4%). Pelo modelo de Van Zelm et al. (2016) Global, foram: o transporte pelo caminhão (77,9%); a construção da estrada (14,0%); e o diesel utilizado no trajeto (1%).

Com relação aos impactos ambientais dos meios de transporte, nas análises para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, os potenciais de impacto apresentaram-se semelhantes para os meios de transportes ferroviário e rodoviário. Contudo, para outras categorias de impacto essa diferença pode ser significativa, como por exemplo para formação de material particulado, ocupação de terra, etc., deste modo, para avaliar o potencial de impacto dos meios de transportes (rodoviário e ferroviário), outras categorias de impacto também devem ser consideradas.

5 CONCLUSÃO

A pesquisa fornece subsídios ao Programa Brasileiro de Avaliação de Ciclo de Vida (PBACV), atendendo aos objetivos do seu segundo tema estratégico: identificar os modelos de caracterização existentes, coletar, atualizar e disponibilizar informações sobre modelos de caracterização, para a categoria de impacto *smog* fotoquímico.

Praticantes de ACV podem escolher entre diferentes métodos/modelos de caracterização para a categoria de impacto ambiental *smog* fotoquímico, contudo, há grandes diferenças entre os modelos encontrados na literatura. Estas diferenças influenciam nos cálculos dos FC, sendo que a escolha de um ou outro modelo apresenta resultados diferentes para um mesmo estudo de ACV. Logo, cuidados na escolha destes modelos devem ser tomados, baseados nos princípios do estudo, objetivando uma melhor ACV.

As diferenças relatadas na descrição, comparação dos modelos e no estudo de caso, foram referentes à diversos fatores, tais como: o propósito e a escala (por exemplo, regional ou global) para a qual o modelo foi desenvolvido; o modelo de transporte químico que pode apresentar resoluções espaciais e formas de cálculos diferentes; os diferentes dados de entrada para o cálculo dos FI, FE, FDa e FDe; a unidade de referência final; a quantidade e qualidade de fluxos elementares considerados pelo modelo na formação do *smog* fotoquímico; e o peso destes dentro do estudo de caso.

Com a análise dos modelos de caracterização e o estudo de caso, presentes neste estudo, concluiu-se que os fluxos elementares que mais contribuem para a formação do fenômeno *smog* fotoquímico são: NO_x, COVNM, monóxido de carbono e dióxido de enxofre. Logo, a presença de FC destes fluxos elementares, no inventário de um modelo de caracterização para a categoria de impacto *smog*, se torna um fator relevante na escolha de um ou outro modelo.

Todos os modelos de caracterização presentes nesta dissertação, representam a formação do *smog* fotoquímico e, neste contexto, podem ser utilizados com confiabilidade por praticantes de ACV. No entanto, alguns deles foram elaborados com o propósito de uso na ACV (KREWITT et al., 2001; VAN GOETHEM et al., 2013; VAN ZELM et al., 2008; 2013; 2016), onde o interesse principal é a avaliação da influência de pequenas mudanças na emissão dos precursores na formação do fenômeno *smog* fotoquímico. Há também outros modelos que foram elaborados com propósitos diferentes (DERWENT et al., 1996; 1998; JENKIN e HAYMAN, 1999), como por exemplo modelar, determinar e/ou estudar a formação do *smog*

fotoquímico em uma determinada região, e que são utilizados em métodos de AICV reconhecidos pela comunidade científica.

Por meio da descrição e análise dos modelos de caracterização, observa-se que cada modelo apresenta uma forma de calcular o nível de impacto ambiental, seja ela por meio de fórmulas, modelos de transporte químico, experimentos em câmeras de *smog* fotoquímico, etc. Outra diferença que também pode ser abordada, é com relação à escala para a qual o modelo foi desenvolvido. Existem modelos desenvolvidos para diferentes regiões do mundo (EUA, Canadá, Japão, Suíça, Europa, etc.) e modelos elaborados em escala global, porém a maioria dos modelos presentes na literatura são elaborados para o ambiente Europeu. Para o Brasil, apenas o modelo de Van Zelm et al. (2016) apresenta FC (em nível nacional), contudo, este possui algumas desvantagens, tais como, apresenta FC para apenas 2 (dois) fluxos elementares, considerando o país como um todo, falta de base de dados secundários nacionais, e até o presente momento o mesmo não está disponível em *softwares* de ACV. Por esta razão, em estudos de ACV realizados no Brasil até então, praticantes de ACV fizeram uso de modelos de caracterização elaborados para outras regiões.

O estudo baseado na tabela de critérios desta dissertação sugere o modelo de Van Zelm et al. (2016) – Global, como uma boa opção para ser utilizado em estudos de ACV no Brasil, pois foi o modelo que apresentou maior nota referente aos critérios. Entretanto, os resultados da pesquisa demonstram a necessidade de estudos de regionalização de modelos de caracterização, para a categoria de impacto *smog* fotoquímico, voltados à realidade brasileira. Outra possibilidade apontada, é a ampliação e ajuste do modelo de Van Zelm et al. (2016) para o Brasil.

Para isso, há a necessidade de buscar parâmetros secundários nacionais e/ou mundiais para os cálculos dos fatores (FI, FE, FDa); buscar estudos sobre o potencial de criação de oxidantes fotoquímicos (PCOF) de substâncias precursoras de *smog* fotoquímico no Brasil, para possibilitar o cálculo dos FC para os COVNM's individuais; e em especial, encontrar um modelo de transporte químico para o cálculo do FI, que represente a formação e dispersão do fenômeno no Brasil. O modelo de transporte químico deve possibilitar a relação entre a emissão de um poluente precursor e a inalação por uma população, como também diferenciar os arquétipos (áreas urbanas, rurais ou remotas) do Brasil.

O modelo de Van Zelm et al. (2016), para o Brasil, considera alguns parâmetros secundários nacionais como: taxa de mortalidade, concentração pré-existente de precursores no país, número de habitantes com idade ≥ 30 anos, e o valor dos anos de vida perdido por caso. No entanto, este modelo, considera um único valor para todo o Brasil, e faz uso de um modelo

de transporte químico mundial (TM5-FASST), o qual pode subestimar a formação do *smog* fotoquímico no Brasil. Assim, no caso de pesquisas futuras, voltadas ao ajuste do modelo de Van Zelm et al. (2016), para o Brasil, sugere-se buscar fatores nacionais: parâmetros secundários, PCOF e modelos de transporte químicos. Com o objetivo de enriquecer, aprimorar e atualizar o modelo, para que ele proporcione resultados mais confiáveis e precisos, em estudos de ACV realizados no Brasil.

REFERÊNCIAS

ABNT – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR ISO 14040: **Avaliação do Ciclo de Vida – Princípios e estrutura**, Rio de Janeiro, Brasil, 2009a.

ABNT – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR ISO 14044: **Avaliação do Ciclo de Vida – Requisitos e orientações**, Rio de Janeiro, Brasil, 2009b.

ALMEIDA NETO, J. A.; LINS, I. O.; ALVARENGA, R. A. F. Recomendação de métodos de contabilização de recursos para o contexto brasileiro. In: V Congresso Brasileiro em Gestão do Ciclo de Vida. 2016, Fortaleza/CE. **Anais...** Fortaleza: Embrapa, 2016.

ALVARENGA, R. A. F. de. **Avaliação de métodos de AICV: um estudo de caso de quatro cenários de ração para frangos de corte**. 158p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2010.

ALVARENGA, R. A. F.; LINS, I. O.; ALMEIDA NETO, J. A. Article evaluation of abiotic resource LCIA methods. **Journal Resources**, v. 5, n. 13, p. 1-21, 2016.

ALVIM, D. S.; GAT, L. V.; CORREA, S. M.; PRETO, A.; ROSSATI, C. S.; ORLANDO, J. P. Compostos Orgânicos Voláteis: principais precursores de ozônio na cidade de São Paulo. **Revista Ciência e Natura**, Santa Maria, v. 36 Ed. Especial II, 2014, p. 434–444. DOI: 10.5902/2179460X13126

AMANN, M.; BERTOK, I.; COFALA, J.; GYARFAS, F.; HEYES, C.; KLIMONT, Z.; SCHÖPP, W. **scenarios for reducing acidification, eutrophication and ground-level ozone in Europe**. International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA), Laxenburg, Austria, Draft Report, May 1999.

AMANN, M.; DERWENT, D.; FORSBERG, B.; HÄNNINEN, O.; HURLEY, F.; KRZYZANOWSKI, M.; LEEUW, F.; SALLY, J.; LIU, C.; MANDIN, J.; SCHNEIDER, P.; SIMPSON, D. Health risks of ozone from long-range transboundary air pollution. **WHO Regional Office for Europe**, ISBN-13-9789289042895, 2008.

American Lung Association. **American lung association state of the air 2013 - health effects of ozone and particle pollution**, 2013. Retrieved from <<http://www.stateoftheair.org/2013/health-risks/>> Acesso: 30 mai. 2017.

ANDERSON, H. R.; ATKINSON, R. W.; PEACOCK, J. L.; MARSTON, L.; KONSTANTINOU, K. Meta-analysis of time-series studies and panel studies of particulate matter (PM) and ozone (O₃) : report of a WHO task group. World Health Organization, London, UK, EUR/04/5046026, 73 p., 2004. DOI: www.who.int/iris/handle/10665/107557

ANDERSSON-SKÖLD, Y.; GRENNFELT, P.; PLEIJEL, K. Photochemical ozone creation potentials: a study of different concepts. **Journal Air Waste Manage. Assoc.** v. 42(9), p. 1152-1158, 1992. DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/10473289.1992.10467060>

ANENBERG, S. C.; HOROWITZ, L. W.; TONG, D. Q.; WEST, J. J. An estimate of the global burden of anthropogenic ozone and fine particulate matter on premature human

mortality using atmospheric modeling. **Journal Environ. Health Perspect.**, 118 (9), p. 1189-1195, 2010.

ATKINSON, R. Atmospheric chemistry of VOCs and NO_x. **Atmospheric Environment**, v.34, p. 2063-2101, 2000.

ATKINSON, R.; BAULCH, D. L.; COX, R. A.; HAMPSON, R. F.; KERR, J. A.; TROE, J. Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry. Supplement IV. **Journal of Physical Chemical Reference Data**, v.21, pp.1125-1568, 1992.

ATKINSON, R.; BAULCH, D. L.; COX, R. A.; HAMPSON, R. F.; KERR, J. A.; ROSSI, M. J.; TROE, J. Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry. Supplement V. **Atmospheric Environment**, v.30, p.3903-3904, 1996.

BAIRD, C; CANN, M. **Química ambiental**. Tradução: Marco Tadeu Grassi; Márcia Matiko Kondo; Maria Cristina Canela; Felix José Nonnenmacher. 4. ed, Porto Alegre - RS: Borkman, 2011, 844 p.

BARE, J. Life cycle impact assessment research developments and needs. **Clean Technologies and Environmental Policy**, v. 12, i. 4, p. 341-351, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10098-009-0265-9>

BARTHOLOMÉ, E.; BELWARD, A. S. GLC2000: a new approach to global land cover mapping from Earth observation data. **International Journal of Remote Sensing**, n. 26, v.9, p. 1959-1977, 2005. DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/01431160412331291297>

BAUMANN, H.; TILLMANN, A. M. **The hitch hiker's guide to LCA: an orientation in Life Cycle Assessment methodology and application**. Lund. Editora: Studentlitteratur AB, 2004, pp. 543.

BELL, M. L.; DOMINICI, F.; SAMET, J. M. A meta-analysis of time-series studies of ozone and mortality with comparison to the national morbidity, mortality, and air pollution study. **Epidemiology**, n.16, v.4: p.436–445, 2005.

BRAGA, B.; HESPANHOL, I.; CONEJO, J.G.L.; BARROS, M.T.L.; SPENCER, M.; PORTO, M.; NUCCI, N.; JULIANO, N.; EIGER, S.; **Introdução à Engenharia Ambiental**, 1ed. São Paulo Prentice Hall, 2002. 305p. ISBN 85-97918-0502.

BRASIL. **Decreto nº 59.113, de 23 de abril de 2013**. Estabelece novos padrões de qualidade do ar e dá providências correlatas. Lex: Coletânea de Legislação e Jurisprudência, São Paulo. Disponível em: < <http://www.al.sp.gov.br/repositorio/legislacao/decreto/2013/decreto-59113-23.04.2013.html> > Acesso em: 06 dez. 2016.

BRASIL. **Portaria nº 100, de 07 de março de 2016**. Aprova os Requisitos Gerais do Programa de Rotulagem Ambiental Tipo III – Declaração Ambiental de Produto (DAP), e da outras providencias. Instituto nacional de metrologia, qualidade e tecnologia – INMETRO. Disponível em: <www.inmetro.gov.br/legislacao/rtac/pdf/RTAC002391.pdf> Acesso em: 06 jun. 2016.

BRASIL. **Resolução nº 03, de 28 de junho de 1990**. Dispõe sobre padrões de qualidade do ar, previstos no PRONAR. CONAMA - Conselho Nacional do Meio Ambiente. Disponível em: <www.mma.gov.br/port/conama/legislacao/CONAMA_RES_CONS_1990_003.pdf>. Acesso em: 06 dez. 2016.

BRASIL. **Resolução nº 04, de 15 de dezembro de 2010.** Dispõe sobre a Aprovação do Programa Brasileiro de Avaliação do Ciclo de Vida e dá outras providências. Ministério do Desenvolvimento, Indústria e Comércio Exterior. CONMETRO. Disponível em: < www.ctpconsultoria.com.br/pdf/Resolucao-04-de-15-12-2010.pdf> Acesso em: 06 jun. 2016.

BRASSEUR, G. P.; ORLANDO, J. J.; TYNDALL, G. S. **Atmospheric Chemistry and Global Change**, 1999. apud CHIQUETTO, J. B. Padrões atmosféricos associados a concentrações de ozônio troposférico na região metropolitana de São Paulo. 2008. Dissertação (Mestrado em Geografia) - Programa de Pós-Graduação em Geografia Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008, 321 f.

BRODE, R. W; WANG, J. Users' guide for the industrial source complex (ISC2) dispersion models volumes I-III. EPA-450/4- 92-008a. EPA-450/4-92-008b. EPA-450/4-92-008c. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina 27711, 1992.

CARTER, W. P. L. **Updated maximum incremental reactivity scale for regulatory applications.** University of California, Riverside, p 73, 1998.

CARTER, W. P. L.; LUO, D.; MALKINA, I. L. **Environmental chamber studies for development of an updated photochemical mechanism for VOC reactivity assessment.** Draft, final report to CARB, CRC, NREL. 1997.

CASTRO, A. L. A.; ANDRADE, E. P.; FIGUEIRÊDO, M. C. B.; UGAYA, C. M. L. Recomendação de modelos de caracterização mais apropriados ao contexto brasileiro para avaliação de impacto na escassez hídrica. In: V Congresso Brasileiro em Gestão do Ciclo de Vida. 2016, Fortaleza/CE. **Anais...** Fortaleza: Embrapa, 2016.

CAVALCANTI, E. P; ALVES, A. D. C.; PENAFORTE, A. G. SILVA, G. A. CARNEIRO, I. O.; ROCHA, T. A. **Modelagem numérica da atmosfera – MNA:** Resolução horizontal e vertical. Módulo 02c. 2013. Disponível em: < <http://www.dca.ufcg.edu.br/mna/>> Acesso em: 15 fev. 2017.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do ar no estado de São Paulo:** série relatórios – 2015. Secretaria do Meio Ambiente. São Paulo/SP, 2015, 165 p.

CHAFE, Z. A.; BRAUER, M.; KLIMONT, Z.; VAN DINGENEN, R.; MEHTA, S.; RAO, S.; RIAHI, K.; DENTENER, F.; SMITH, K. R. Household cooking with fuels contributes to ambient PM_{2,5} air pollution and the burden of disease. **Journal Environmental Health Perspect**, 122 (12), p. 1314-1320, 2014.

CUNHA, M. R. **A influência da poluição do ar em Curitiba sobre o bioindicador *Nicotiana tabacum* L. (SOLANACEAE) Var. Bel-W3.** 2004, 76 f. Dissertação (Curso de Pós-Graduação em Botânica do Departamento de Botânica) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba- PR, 2004.

CURTIS, A. R.; SWEETENHAM, W. P. **FACSIMILE release H user's manual.** AERE Report R-11771, HMSO, London, 1987.

DeMore, W. B.; SANDER, S. P.; GOLDEN, D. M.; HAMPSON, R. F.; KURYLO, M. J.; HOWARD, C. J.; RAVISHANKARA, A. R.; KOLB, C. E.; MOLINA, M. J. **Chemical**

kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling. NASA Panel for Data Evaluation No. 10. Jet Propulsion Laboratory 94-26, JPL, Pasadena, CA, USA, 1994.

DERWENT, R. G.; JENKIN, M. E. Hydrocarbons and the long-range transport of ozone and PAN across Europe. **Atmospheric Environment**, v. 25A (8), p. 181-199, 1991.

DERWENT, R. G.; JENKIN, M. E.; PASSANT, N. R.; PILLING, M. J. Photochemical ozone creation potentials (POCPs) for different emission sources of organic compounds under European conditions estimated with a Master Chemical Mechanism. **Atmospheric Environment**, v.41, n.12, p. 2570-2579, 2007a. DOI:doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.11.019

DERWENT, R. G.; JENKIN, M. E.; PASSANT, N. R.; PILLING, M. J. Reactivity-based strategies for photochemical ozone control in Europe. **Environmental Science & Policy**, v.10, v.5, p.445-453, 2007b. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2007.01.005>

DERWENT, R. G.; JENKIN, M. E.; SAUNDERS, S. M. Photochemical ozone creation potentials for a large number of reactive hydrocarbons under European conditions. **Atmospheric Environment**, v.30, p.181-199, 1996.

DERWENT, R. G.; JENKIN, M. E.; SAUNDERS, S. M.; PILLING, M. J. Photochemical ozone creation potentials for organic compounds in northwest Europe calculated with a master chemical mechanism. **Atmospheric Environment**, v. 32, n.14/15, p. 2429-2441, 1998. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(98\)00053-3](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00053-3)

EC-JRC - European Commission Joint Research Centre. **Framework and requirements for Life Cycle Impact Assessment models and indicators.** ILCD handbook - International Reference Life Cycle Data System, European Union EUR 24586 EN, 2010.

EC-JRC - European Commission Joint Research Centre. **Recommendations for Life Cycle Impact Assessment in the European context:** based on existing environmental impact assessment models and factors. ILCD handbook - International Reference Life Cycle Data System, European Union EUR24571EN, 2011.

European Commission: Externalities of Fuel Cycles. European Commission, DG XII, Science, Research and Development, JOULE. ExterneE - Externalities of Energy. Volume 7: Methodology 1998 update. Published by the European Commission, EUR 19083, 1999.

EUROSTAT - Your key to European statistics. **Health data navigation tree.** European Commission. 2007. From: <http://epp.eurostat.ec.europa.eu/>.

FEPAM - Fundação Estadual de Proteção Ambiental Henrique Luis Roessler. **Rede estadual de monitoramento automático da qualidade do ar:** Relatório 2013 e 2014. Secretaria do Meio Ambiente. Porto Alegre - RS, 2015.

FINNVEDEN, G.; HAUSCHILD, M. Z.; EKVALL, T.; GUINEE, J.; HEIJUNGS, R.; HELLWEG, S.; KOEHLER, A.; PENNINGTON, D.; SUH, S. Recent developments in Life Cycle Assessment. **Journal of Environmental Management**, v. 91, p. 1-21, 2009. DOI: 10.1016/j.jenvman.2009.06.018

FIORE, A. M.; JACOB, D. J.; BEY, I.; YANTOSCA, R. M.; FIELD, B. D.; FUSCO, A. C. Background ozone over the United States in summer: Origin, trend, and contribution to

pollution episodes. **Journal of geophysical research**, v.107, n. d15, 4275, p 1-11, 2002. DOI: 10.1029/2001JD000982.

FRIEDRICH, R.; KUHN, A.; BESSAGNET, B.; BLES, M.; BRUCHOF, D.; COWIE, H.; FANTKE, P.; GERHARZ, L.; GRILLIER, J.; GUSEV, A.; HAVERINEN-SHEUGHNESSY, U.; HOUT, D.; HURLEY, F.; HUYNEN, M.; KAMPPFMEYER, T.; KARABELAS, A.; KARAKISIOS, S.; KNOL, A.; KOBER, T.; KOLLANUS, V.; KONTOROUPI, P.; KUGLER, U.; LOH, M.; MELEUX, F.; MILLER, B.; MÜLLER, W.; NIKOLAKI, S.; PANASIUK, D.; PREISS, P.; RINTALA, T.; ROOS, J.; ROUSTAN, Y.; SALOMONS, E.; SÁNCHEZ JIMÉNEZ, A.; SARIGIANNIS, D.; SCHENK, K.; SHAFRIR, A.; SHATALOV, O.; TSYRO, S.; TOUMISTO, J.; VINNEAU, D.; WAGNER, S.; YANG, A. D 5.3.1/2 Methods and Results of the HEIMTSA/INTARESE Common Case Study. 2011. The institute of occupational medicine. Available at: <http://www.integrated-assessment.eu/sites/default/files/CCS_FINAL_REPORT_final.pdf> Acesso em: 10 jan. 2017.

GALPERIN, M.; SOFIEV, M.; AFINOGENOVA, L. Long-term modelling of airborne pollution within the Northern Hemisphere. **Water, air and soil pollution**. 85, p.2051-2056, 1995. apud VAN ZELM, R.; HUIJBREGTS M. A. J.; DEN HOLLANDER, H. A.; VAN JAARSVELD, H. A.; SAUTER, F. J.; STRUIJS, J.; VAN WIJNEN, H. J.; VAN DE MEENT, D. European characterization factors for human health damage of PM₁₀ and ozone in life cycle impact assessment. **Atmospheric Environment**, v. 42, p. 441-453, 2008.

GERY, M. W.; WHITTEN, G. Z.; KILLUS, J. P.; DODGE, M. C. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modelling. **Journal of Geophysical Research**, v. 94, pp.12925-1956, 1989.

GOEDKOOOP, M. J.; SPRIENSMA, R. The eco-indicator99: a damage oriented method for life-cycle impact assessment. PRé consultants B.V., Plotterweg12, 3821BB Amersfoort, 2001.

GOEDKOOOP, M.; HEIJUNGS, R.; HUIJBREGTS, M.; SCHRYVER, A. D.; STRUIJS, J.; VAN ZELM, R. **ReCiPe 2008: A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level**. Ruimte em Milieu, Ministerie van Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening em Milieubeheer. Report I: Characterisation, first edition (version 1.08), 2013, 126 p.

GRONLUND, C.; HUMBERT, S.; SHAKED, S.; O'NEILL, M.; JOLLIET, O. Characterizing the burden of disease of particulate matter for life cycle impact assessment. **Air Quality, Atmosphere & Health**, 8, p.29-46, 2015.

GUINÉE, J. eds. **Danish-Dutch workshop on LCA methods**, held on 16-17 September 1999 at CML, Leiden University: Final report, 26-10-99. 113 p. 1999.

HAUSCHILD, M. Z.; HUIJBREGTS, M. A. J. Introducing Life Cycle Impact Assessment. Chapter 1. In: HAUSCHILD, M. Z.; HUIJBREGTS, M. A. J. **Journal of Life Cycle Impact Assessment**. LCA Compendium – The Complete World of Life Cycle Assessment. New York: Springer, 2015. 339 p.

HAUSCHILD, M. Z.; POTTING, J.; HERTEL, O.; SCHÖPP, W.; BASTRUP-BIRK, A. Spatial differentiation in the characterization of photochemical ozone formation, the EDIP2003 methodology. **International Journal of Life Cycle Assessment**, 11 (Special (1)), p. 72-80, 2006.

HUIJBREGTS, M. A. J.; STEINMANN, Z. J. N.; ELSHOUT, P. M. F.; STAM, G.; VERONES, F.; VIEIRA, M. D. M.; HOLLANDER, A.; ZIJP, M.; VAN ZELM, R. **ReCiPe 2016**: A harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level. Report I: Characterization. National Institute for Public Health and the Environment. Ministry of health, Welfanes and Sport. RIVM Report 2016-0104, 2016. DOI: <http://hdl.handle.net/10029/620793>

HUIJBREGTS, M. A. J.; STEINMANN, Z. J. N.; ELSHOUT, P. M. F.; STAM, G.; VERONES, F.; VIEIRA, M.; ZIJP, M.; HOLLANDER, A.; VAN ZELM, R. ReCiPe 2016: a harmonised life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level. **International Journal of Life Cycle Assessment**. v.22, n. 2, p.138–147, 2017. DOI: 10.1007/s11367-016-1246-y

HUIJNEN, V.; WILLIAMS, J.; VAN WEELE, M.; VAN NOIJE, T.; KROL, M.; DENTERNER, F.; SEGERS, A.; HOUWELING, S.; PETERS, W.; DE LAAT, J.; BOERSMA, F.; BERGAMASCHI, P.; VAN VELTHOVEN, P.; LE SAGER, P.; ESKES, H.; ALKEMADE, F.; SCHEELE, R.; NEDELEC, P.; PAETZ, H. W. The global chemistry transport model TM5: description and evaluation of the tropospheric chemistry version 3.0. **Geoscientific Model Development**, v.3, n.2, p.445-473, 2010.

IRCEL - CELINE: Belgian Interregional Environment Agency. **AOT40 vegetation**. 2017. Disponível em: <<http://www.irceline.be/en/air-quality/measurements/ozone/history/trends/aot40-vegetation>> Assess: 31 mai. 2017.

ITSUBO, N. et al. LIME documentation. **Photochemical oxidants**. Chapter 2.5 of draft English translation of LIME documentation (figures and tables in Japanese), 2008.

JENKIN, M. E.; HAYMAN, G. D. Photochemical ozone creation potentials for oxygenated volatile organic compounds: sensitivity to variations in kinetic and mechanistic parameters. **Atmospheric Environment**, v. 33, pp. 1275-1293, 1999. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(98\)00261-1](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00261-1)

JENKIN, M. E.; SAUNDERS, S. M.; PILLING, M. J. The tropospheric degradation of volatile organic compounds: a protocol for mechanism development. **Atmospheric Environment**, v.31, pp.81-104, 1997.

JERRETT, M.; BURNETT, R. T.; POPE, C. A.; ITO, K.; THRUSTON, G.; KREWSKI, D.; SHI, Y. L.; CALLE, E.; THUN, M. Long-term ozone exposure and mortality. **The New England Journal of Medicine**, 360 (11), p. 1085-1095, 2009.

KEMNA, R.; VAN ELBURG, M.; LI, W.; VAN HOLSTEIJN, R. MEEuP methodology report, final, 28.11.05. **VHK for European Commission**, Brussels, 2005.

KLEPPER, O.; BAKKER, J.; TRAAS, T. P.; VAN DE MEENT, D. Mapping the potentially affected fraction (PAF) of species as a basis for comparison of ecotoxicological risks between substances and regions. **Journal of Hazardous Materials**, v.61, (1–3), p.337–344, 1998. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0304-3894\(98\)00141-1](https://doi.org/10.1016/S0304-3894(98)00141-1)

KNOL, A. B.; STAATSEN, B. A. M. **Trends in the environmental burden of disease in the Netherlands, 1980 – 2020**. RIVM report 500029001/2005, Bilthoven, The Netherlands, 2005.

KREWITT, W.; TRUKENMILLER, A.; BACHMANN, T. M.; HECK, T. Country-specific damage factors for air pollutants: a step towards site dependent Life Cycle Impact Assessment. **International Journal of Life Cycle Assessment**. 6 (4), p. 199 – 210, 2001.

KROL, M.; HOUWELING, S.; BREGMAN, B.; VAN DEN BROEK, M.; SEGERS, A.; VAN VELTHOVEN, P.; PETERS, W.; DENTENER, F.; BERGAMASCHI, P. The two-way nested global chemistry-transport zoom model TM5: algorithm and applications. **Journal Atmospheric Chemistry and Physics**, 5, p. 417-432, 2005.

LAMARQUE, J. F.; BOND, T. C.; EYRING, V.; GRANIER, C.; HEIL, A.; KLIMONT, Z.; LEE, D.; LIOUSSE, C.; MIEVILLE, A.; OWEN, B.; SCHULTZ, M. G.; SCHINDELL, D.; SMITH, S. J.; STEHFEST, E.; VAN AARDENNE, J.; COOPER, O. R.; KAINUMA, M.; MAHOWALD, N.; McCONNELL, J. R.; NAIK, V.; VAN VUUREN, D. P. Historical (1850-2000) gridded anthropogenic and biomass burning emissions of reactive gases and aerosols: methodology and application. **Journal Atmospheric Chemistry and Physics**, 10 (15), p. 7017-7039, 2010. DOI:10.5194/acp-10-7017-2010

LRTAP convention. Manual on methodologies and criteria for modeling and mapping critical loads & levels and air pollution effects, risks and trends. In: **convention on long-range transboundary air pollution**, 2004. Disponível em: <<http://www.icpmpping.org>>. Acesso em: 24 mai. 2017.

LURMANN, F. W.; CARTER, W. P. L.; COYNER, L. A. **A surrogate species chemical mechanism for urban-scale air quality simulation models**. US EPA Report EPA/600/ 3-87/014, United States Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, 1987.

MARROQUÍN, M. C. **Adequação às condições Brasileiras de modelos de caracterização para a categoria de impacto uso do solo**, 2013. 147f. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Departamento de Engenharia Química II, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo - SP, 2013.

MARTINELLI, M. A.; REZENDE, M. T. R. Inmetro vai avaliar o desenvolvimento ambiental de produtos nacionais. **Meio Ambiente Rio**. Rio de Janeiro/ RJ, jan. 2016. Disponível em: <<http://meioambienterio.com/2016/01/13147/inmetro-avaliar-desempenho-ambiental-produtos/>> Acesso em: 10 mai. 2016.

McINNES, G. Atmospheric emission inventory guidebook. A joint EMEP/CORINAIR Production, **European Environment Agency**, Copenhagen, First Edition February, 1996.

MENDES, N. C. **Métodos e modelos de caracterização para a Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida**: análise e subsídio para a aplicação no Brasil. 2013. 149f. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos. Departamento de Engenharia de Produção, Universidade de São Paulo – USP, São Carlos – SP, 2013.

NEVERS, N. de. **Air pollution control engineering**. Second edition. McGRAW-HILL International editions: civil engineering series, 2000. 590 p.

ONU - United Nations. **Our common future**: report of the world commission on environment and development. United Nations (WCED), Oxford University Press, Oxford, 1987, p. 247.

ONU - United Nations. **World population prospect: the 2010 Revision**, CD-rom Edition. – File 1: Total population (Both sexes combined) by Five-year Age Group, Major Area, Region and Country, 1950-2100 (thousands), Variant “Estimates”. Department of Economic and Social Affairs, Population Division, United, New York, USA. 2011.

ORLANDO, J. P. **Estudo dos precursores de ozônio na cidade de São Paulo através de simulações computacionais**. 2008, 116 f. Dissertação (Mestrado em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo - SP, 2008.

ORLANDO, J. P.; ALVIM, D. S.; YAMAZAKIA, A.; CORRÊA, S. M.; GATTIA, L. V. Ozone precursors for the São Paulo Metropolitan Area. **Science of the total environment**. v. 408, n.7, mar. 2010, p.1612-1620. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2009.11.060>

PAVAN, A. L. R.; ALMEIDA NETO, J. A.; ALVARENGA, R. A. F.; FIGUEIRÊDO, M. C. B.; KABE, Y. H. O. Avaliação de impactos do uso da terra em serviços ecossistêmicos: recomendação de métodos de avaliação de impacto do ciclo de vida (AICV) para o Brasil. In: V Congresso Brasileiro em Gestão do Ciclo de Vida. 2016, Fortaleza/CE. **Anais...** Fortaleza: Embrapa, 2016.

PEGORARO, L. A. **Desenvolvimento de fatores de caracterização para toxicidade humana em Avaliação do Impacto do Ciclo de Vida no Brasil**, 2008, Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 103p, 2008.

PICOLI, J. F. **Relatório final de estágio**. Campinas, 2009, 19 f. Relatório final de estágio (Bacharel em Engenharia de Alimentos) – Universidade Estadual de Campinas. Embrapa Meio Ambiente, 2014, (ACV da cana-de-açúcar – Embrapa Meio Ambiente).

PRÉ CONSULTANTS. SimaPro. versão 8.3.0.0. 2016.

PRÉ CONSULTANTS. SimaPro. versão 8.5.0.0. 2017.

PREISS, P. Chapter 7: Photochemical ozone formation. p. 115-138. In: HAUSCHILD, M. Z.; HUIJBREGTS, M. A. J. **Life Cycle Impact Assessment**. LCA Compendium – The Complete World of Life Cycle Assessment. New York: Springer, 2015, 339 p.

PREISS, P.; ROOS J.; VAN DINGENEN, R.; DENTENER, F.; FRIEDRICH, R. Photochemical ozone formation and effects on human health. In: **LC-IMPACT**, D3.5, Project n°: 243827 FP7-ENV-2009-1, 2012. apud PREISS, P. Chapter 7: Photochemical ozone formation. p. 115-138. In: HAUSCHILD, M. Z.; HUIJBREGTS, M. A. J. **Life Cycle Impact Assessment**. LCA Compendium – The Complete World of Life Cycle Assessment. New York: Springer, 2015, 339 p.

RAO, S.; CHIRKOW, V.; DENTENER, F.; VAN DINGENEN, R.; PANCHAU, S.; PUROHIT, P.; AMANN, M.; HEYES, C.; KINNEY, P.; KOLP, P.; KLIMONT, Z.; RIAHI, K.; SCHOEPP, W. Environment modeling and methods for estimation of the global health impacts of air pollution. **Journal Environmental Modeling & Assessment**. 17 (6), p. 613-622, 2012.

RENOU, S.; THOMAS, J. S.; AOUSTIN, E.; PONS, M. N. Influence of impact assessment methods in wastewater treatment LCA. **Journal of Cleaner Production**, v.16, p. 1098-1105, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2007.06.003>

ROCHA, J. C.; ROSA, A. H.; CARDOSO, A. A. **Introdução à química ambiental**. 2º ed, Porto Alegre: Bookman, 2009, 256 p.

ROSENBAUM, R. K.; BACHMANN, T. M.; GOLD, L. S.; HUIJBREGTS, M. A. J.; JOLLIET, O.; JURASKE, R.; KOEHLER, A.; LARSEN, H. F.; MacLEOD, M.; MARGNI, M.; McKONE, T. E.; PAYET, J.; SCHUHMACHER, M.; VAN de MEENT, D.; HAUSCHILD, M. Z. USEtox-the UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment. **The International Journal of Life Cycle Assessment**. n.13, v.7, p. 532-546, 2008. DOI: 10.1007/s11367-008-0038-4

SANTOS, L. M. M. dos. **Avaliação ambiental de processos industriais**. 2. Ed, São Paulo - SP: Signus editora, 2006, 130 p.

SAUNDERS, S. M.; JENKIN, M. E.; DERWENT, R. G.; PILLING, M. J. Report summary: World Wide Web site of a Master Chemical Mechanism (MCM) for use in tropospheric chemistry models. **Atmospheric Environment**, vol. 31, p. 1249, 1997.

SAUNDERS, S. M.; JENKIN, M. E.; DERWENT, R. G.; PILLING, M. J.: Protocol for the development of the Master Chemical Mechanism, MCM v3 (Part A): tropospheric degradation of non-aromatic volatile organic compounds, **Journal Atmospheric Chemistry and Physics**, 3, pp. 161-180, 2003. DOI:10.5194/acp-3-161-2003.

SCHAAP, M.; TIMMERMAN, R. M. A.; ROEMER, M.; BOERSEN, M.; BUILTJES, P. J. H.; SAUTER, F. J.; VELDERS, G. J. M.; BECK, J. P. The LOTOS-EUROS model: description, validation and latest developments. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 32, n.º. 2, 2008.

SEBAUGH, J. L. Guidelines for accurate EC50/IC50 estimation. **Pharm Stat**, n.10, v.2:1, p. 28-34, 2011. DOI: 10.1002/pst.426.

SEINFELD, J.H.; PANDIS, S.P. **Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**. New York, USA: John Wiley & Sons Inc., 1998. p. 20-111, 140-152, 234-330, 766-775, 1098. apud ORLANDO, J. P. **Estudo dos precursores de ozônio na cidade de São Paulo através de simulações computacionais**. 2008, 116 f. Dissertação (Mestrado em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo - SP, 2008.

SEO, E. S. M.; KULAY, L. A. Avaliação do ciclo de vida: ferramenta gerencial para tomada de decisão. **Revista de Gestão Integrada em Saúde do Trabalho e Meio Ambiente**. Interfacehs: v.1, n.1, Art. 4, ago. 2006.

SIMAPRO - **SimaPro Database Manual**: Methods Library. PRé, various authors, v. 2.9, April 2016. Disponível em: <<https://www.pre-sustainability.com/download/DatabaseManualMethods.pdf>> Acesso em: 27 nov. 2017.

SIMPSON, D.; ELIASSEN, A. Control strategies for ozone and acid deposition - an iterative approach, Norwegian Meteorological Institute, EMEP MSC-W Note 5/97, 1997.

SIMPSON, D.; FAGERLI, H.; JONSON, J. E.; TSYRO, S.; WIND, P. Transboundary acidification, eutrophication and ground level ozone in Europe. PART I: Unified EMEP

Model Description. EMEP/MSC-W Status Report 2003. ISSN 0806-4520. **Norwegian Meteorological Institute**, Oslo, Norway, 2003. Disponível em: <www.emep.int/publ/reports/2003/emep_report_1_part1_2003.pdf> Acesso em: 24 mai. 2017.

SIMPSON, D.; OLENDRZYNSKI, K.; SEMB, A.; STOREN, E.; UNGER, S. Photochemical oxidant modelling in Europe: multi-annual modelling and source-receptor relationships. EMEP/MSC-W Report 3/97, Oslo, 1997.

SOUZA, A. de. **A influência das variáveis ambientais (meteorológicas e qualidade do ar) na morbidade respiratória na cidade de Campo Grande – MS**. 2013, 106 f. Tese (Programa de Pós-graduação em Tecnologias Ambientais). Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, Campo Grande - MS, 2013.

SOUZA, D. M. de. **Proposta de um modelo de caracterização de impactos do uso da terra, segundo indicadores de biodiversidade, em AICV: cálculo de fatores de caracterização para ecorregiões brasileiras**. 2010, 312 f. Tese (Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental). Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis - SC, 2010.

STEEN, B. **A systematic approach to environmental priority strategies in product development (EPS) Version 2000**: models and data of the default method. Chalmers University of Technology, Go, 1999.

TANG, L.; NAGASHIMA, T.; HASEGAWA, K.; OHARA, T.; SUDO, K.; ITSUDO, N. Development of human health damage factors for thropospheric ozone considering transboundary transport on global scale. **International Journal of Life Cycle Assessment**. 2016. Disponível em: <[dx.doi.org/10.1007/s11367-015-1001-9](https://doi.org/10.1007/s11367-015-1001-9)> Acesso em: 10 jan. 2017.

TARRASÓN, L. Report on deliveries of source-receptor matrices with the regional EMEP Unified model. NEEDS project, FP6, Technical Paper n° 1.2 - RS 1b. Project n°: 502687, 2009a.

TARRASÓN, L. Report on meteorology to account for non-linearity of impacts depending on different background emission scenarios. NEEDS project, FP6, Technical Paper n° 1.2 - RS 1b. Project n°: 502687, 2009b.

TARRASÓN, L.; BENEDICTOW, A.; BENESTAD, R.; JONSON, J. E.; HANSSEN-BAUER, I.; LANGNER, J.; ANDERSON, C.; BERGSTRÖM, R. **Meteorological years available for use in integrated assessment modelling for the review of the National Emission Ceilings Directive (NECD)**. 2005. Note prepared for the CAFE Steering Group under request by the European Commission. apud VAN ZELM, R.; HUIJBREGTS M. A. J.; DEN HOLLANDER, H. A.; VAN JAARSVELD, H. A.; SAUTER, F. J.; STRUIJS, J.; VAN WIJNEN, H. J.; VAN DE MEENT, D. European characterization factors for human health damage of PM₁₀ and ozone in life cycle impact assessment. **Atmospheric Environment**, v. 42, pg. 441-453, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.09.072>

TONG, D. Q.; MULLER, N. Z.; MAUZERALL, D. L.; MENDELSON, R. O. Integrated assessment of the spatial variability of ozone impacts from emissions of nitrogen oxides. **Environmental Science & Technology**, 40 (5), p. 1395-1400, 2006. DOI: 10.1021/es052452n

TRUKENMILLER, A.; FRIEDRICH, R. Die Abbildung der großräumigen Verteilung, chemischen Umwandlung und Deposition von Luftschadstoffen mit dem Trajektorienmodell WTM, in: Jahresbericht 1995, ALS Universität Stuttgart, pp 93-108, 1995.

TUOVINEN, J.-P. Assessing vegetation exposure to ozone: properties of the AOT40 index and modifications by deposition modelling. **Environmental Pollution**, v.109 (3), p.361–372, 2000. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(00\)00040-3](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(00)00040-3)

U.S. EPA. Exposure factors Handbook. National Center for Environmental Assessment, Office of Research and Development, Washington, DC, 1997.

UDO DE HAES, H. A; FINNVEDEN, G; GOEDKOOP, M. J; HAUSCHILD, M; HERTWICH, E. G; HOFSTETTER, P; JOLLIET, O; KLÖPPER, W; KREWITT, W; LINDEIJER, E; MÜLLER WENK, R; OLSEN, S. I; PENNINGTON, D. W; POTTING, J; STEEN, B. **Life-cycle impact assessment: striving towards best practice**. SETAC, Pensacola (FL), USA, 2002. apud VAN ZELM, R. **Damage modeling in life cycle impact assessment**. PhD-thesis (Radboud University, Nijmegen) Radboud University, Nijmegen, 2010, 250 p. 2010.

UGAYA, C.M.L.; ALVARENGA, R.; PAVAN, A.L.R.; OMETTO, A.R.; LIMA, E.G.; OLIVEIRA, J.M.; ALMEIDA NETO, J.A.; PEGORARO, L.A.; BARRANTES, L.S.; MENDES, N.C.; TADANO, Y.; FIGUEIREDO, M.C. Rede de Pesquisa em Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida: critérios para recomendação de métodos e modelos de caracterização para o Brasil. In: V Congresso Brasileiro em Gestão do Ciclo de Vida (V CBGCV), 5, 2016, Fortaleza/CE, **Anais...** Fortaleza/CE, 19 a 22 de setembro de 2016.

UK PORC. **Ozone in the United Kingdom**. Third Report of UK Photochemical Oxidants Review Group, Harwell Laboratory, Oxfordshire, 1993.

UNEP – *United Nations Environment Programme* and Climate and CCAC - *Clean Air Coalition*. **Integrated assessment of short-lived climate pollutants in Latin America and the Caribbean**: Improving air quality while contributing to climate change mitigation. Job No: DEW/1969/NA ISBN: 978-92-807-3549-9. 2016. 48 f.

VAN DINGENEN, R.; DENTENER, F. J.; RAES, F.; KROL, M. C.; EMBERSON, L.; COFALA, J. The global impact of ozone on agricultural crop yields under current and future air quality legislation. **Journal atmospheric environment**, 43 (3), p. 604-618. 2009. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.10.033>

VAN GOETHEM, T. M. W. J.; AZEVEDO, L. B.; VAN ZELM, R.; HAYES, F.; ASHMORE, M. R.; HUIJBREGTS, M. A. J. Plant species sensitivity distributions for ozone exposure. **Environmental Pollution**, n.178, p.1-6, 2013b. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2013.02.023>

VAN GOETHEM, T. M. W. J.; PREISS, P.; AZEVEDO, L. B.; FRIEDRICH, R.; HUIJBREGTS, M. A. J.; VAN ZELM, R. European characterization factors for damage to natural vegetation by ozone in life cycle impact assessment. **Journal Atmospheric Environment**, n.77, p.318-324, 2013a. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.05.009>

VAN LOON, M.; VAUTARD, R.; SCHAAP, M.; BERGSTRÖM, R.; BESSAGNET, B.; BRANDT, J.; BUILTJES, P.J.H.; CHRISTENSEN, J.H.; CUVELIEG, C.; GRAFF, A.;

JONSON, J.E.; KROL, M.; LANGNER, J.; ROBERTS, P. Evaluation of long-term ozone simulations from seven regional air quality models and their ensemble. **Journal Atmospheric Environment**, v.41, (10) p.2083–2097, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.10.073>

VAN ZELM, R. **Damage modeling in life cycle impact assessment**. PhD-thesis (Radboud University, Nijmegen) Radboud University, Nijmegen, 2010, 250 p. 2010.

VAN ZELM, R.; HUIJBREGTS M. A. J.; DEN HOLLANDER, H. A.; VAN JAARSVELD, H. A.; SAUTER, F. J.; STRUIJS, J.; VAN WIJNEN, H. J.; VAN DE MEENT, D. European characterization factors for human health damage of PM₁₀ and ozone in life cycle impact assessment. **Journal Atmospheric Environment**, v. 42, p.441-453, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.09.072>

VAN ZELM, R.; HUIJBREGTS, M. A. J.; HOLLANDER, H. A. DEN; JAARSVELD, H. A. VAN; SAUTER, F. J.; STRUIJS, J.; WIJNEN, H. J. VAN; MEENT, D.; VAN DE. Human health damage due to PM₁₀ and ozone²⁰. Chapter 8. In: GOEDKOOP, M.; HEIJUNGS, R.; HUIJBREGTS, M.; SCHRYVER, An de; STRUIJS, J.; VAN ZELM, R. **ReCiPe 2008: A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level**. Report I: Characterisation, first edition (version 1.08), 2013, 126 p. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.09.072>

VAN ZELM, R.; PREISS, P.; VAN GOETHEM, T. M. W. J.; VAN DINGENEN, R.; HUIJBREGTS, M. Regionalized life cycle impact assessment of air pollution on the global scale: damage to human health and vegetation. **Journal Atmospheric Environment**, v. 134, p. 129-137, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.03.044>

VAUTARD, R.; BUILTJES, P.H.J.; THUNIS, P.; CUVELIER, C.; BEDOGNI, M.; BESSAGNET, B.; HONORÉ, C.; MOUSSIOPOULOS, N.; PIROVANO, G.; SCHAAP, M.; STERN, R.; TARRASÓN, L.; WIND, P. Evaluation and intercomparison of ozone and PM₁₀ simulations by several chemistry transport models over four European cities within the CityDelta project. **Atmospheric Environment**, v.41, p.173–188, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.07.039>

VESTRENG, V.; MARECKOVA, K.; KAKAREKA, S.; MALCHYKHINA, A.; KUKHARCHYK, T. Inventory review 2010: emission data reported to LRTAP convention and NEC directive. **EMEP**, 2012. Disponível em: <www.ceip.at> Acesso em: 24 maio 2017.

VIGON, B. W. (coord.). **Life-cycle assessment: inventory guidelines and principles**, 1. Ed. Cincinnati, RREL/USEPA, 1993. 132p.

WHO - World Health Organization. **Health risks of air pollution in Europe-HRAPIE**: project recommendations for concentration-response functions for costbenefit analysis of particulate matter, ozone and nitrogen dioxide, WHO, Geneva, Switzerland, 2013.

WHO - World Health Organization. **Health statistics and information systems**: Metrics: Disability-Adjusted Life Year (DALY), 2017. From: <www.who.int/healthinfo/global_burden_disease/metrics_daly/en/> Acesso: 30 maio 2017.

WHO - World Health Organization. **WHO Expert Meeting**: Methods and tools for assessing the health risks of air pollution at local, national and international level. 2014, Meeting report Bonn, Germany, 12-13 May 2014.