



JEFFERSON WENNIO MARINHO MACHADO

**VERIFICAÇÃO DO *FIRE DYNAMICS SIMULATOR* PARA
ESTUDOS DE DISPERSÃO DE PARTÍCULAS**

São Luís
2026

JEFFERSON WENNIO MARINHO MACHADO

**VERIFICAÇÃO DO *FIRE DYNAMICS SIMULATOR* PARA
ESTUDOS DE DISPERSÃO DE PARTÍCULAS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Colegiado de Curso da Engenharia Química do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Graduação em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Elmo de Sena Ferreira Júnior

São Luís
2026

Machado, Jefferson Wennio Marinho.

Verificação do Fire Dynamics Simulator para Estudos de
Dispersão de Partículas / Jefferson Wennio Marinho
Machado. - 2026.

74 p.

Orientador(a): Elmo de Sena Ferreira Júnior.

Curso de Engenharia Química, Universidade Federal do
Maranhão, São Luís, 2026.

1. Particulados. 2. Dispersão. 3. Cfd. 4.
Simulação. 5. Verificação. I. Júnior, Elmo de Sena
Ferreira. II. Título.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. ELMO DE SENA FERREIRA JÚNIOR
Orientador – COEQ/CCET/UFMA

Prof.^a M^a FERNANDA HELLEN DE SOUZA SANTOS
EAER/CCET/UFMA

Eng. VICTOR GABRIEL PEREIRA VALVERTE
RD ENGENHARIA LTDA./MA

21 de janeiro de 2026

DADOS CURRICULARES**Jefferson Wennio Marinho Machado**

NASCIMENTO 14/03/2001 – CAXIAS / MA

FILIAÇÃO José Williams Carneiro Machado
Ercília Alves Marinho

2019/2025 Curso de Graduação
Engenharia Química - Universidade Federal do Maranhão

Dedico este trabalho aos meus pais, por me fornecerem a estrutura inicial que me trouxe até aqui.

AGRADECIMENTOS

A espiritualidade por ter me guiado e me fortalecido todos os dias na caminhada da vida.

Ao meu orientador, Prof. Elmo Ferreira, pela orientação e auxílio.

Ao Prof. Harvey Vélez por ter me dado a oportunidade de participar do projeto “Cadeias Sustentáveis” junto com a EMBRAPA/COCAIS, que me gerou bons frutos profissionais.

Aos meus tios Elizabeth Marinho e Hugo Miranda por serem a minha base fora de casa.

A minha irmã Wyslana Marinho por ser minha maior referência de coragem e independência.

A todos os amigos que já estiveram ou estão presentes na trajetória até aqui.

A meu pai José Williams por ter me ensinado a fazer bons acordos.

A minha mãe Ercília Alves Marinho por ter me ensinado que nenhum acordo é mais valioso do que aquele que firmamos com nós mesmos.

“Sempre é tempo, e os tempos são muitos, mas não se descuide, porque eles passam. Mas, pensando bem, se o tempo passar, não se dê por vencido, outro tempo virá. Ou você há de inventar um novo tempo.”

Joice Berth

MACHADO, Jefferson Wennio Marinho. **Verificação do *Fire Dynamic Simulator* para Estudos de Dispersão de Partículas**. 2026. 74. Trabalho de Conclusão de Curso de Engenharia Química do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2026.

RESUMO

A intensificação das regulações ambientais e o debate sobre mudanças climáticas impulsionam a busca por ferramentas precisas para a avaliação da dispersão de poluentes, especialmente materiais particulados ($MP_{2,5}$ e MP_{10}), e, diante da complexidade desses fenômenos e da dificuldade de reprodução experimental, a Fluidodinâmica Computacional surge como alternativa relevante. Este estudo teve como objetivo verificar a aplicabilidade do *Fire Dynamics Simulator* (FDS) para estudos de dispersão de partículas sólidas no ar, avaliando a capacidade do solver em prever o coeficiente de arraste e a velocidade terminal de partículas esféricas, cilíndricas e discoidais, modeladas por equivalência de área projetada a partir de tamanhos aerodinâmicos de $5\ \mu\text{m}$ e $50\ \mu\text{m}$. A comparação entre os resultados numéricos e as soluções analíticas indicou boa concordância na previsão do coeficiente de arraste, com erros relativos inferiores a 5%, embora com maior dispersão no regime de Stokes, sobretudo para partículas menores, evidenciando maior sensibilidade numérica em escoamentos dominados por forças viscosas, enquanto no regime de transição observou-se maior robustez do modelo. Na determinação da velocidade terminal, o FDS apresentou excelente desempenho para partículas esféricas e cilíndricas, com erros da ordem de 1%; entretanto, para partículas discoidais, observou-se uma discrepância sistemática elevada, da ordem de 70%, caracterizada por forte linearidade e baixos desvios-padrão, afastando a hipótese de erro numérico e indicando uma limitação associada à metodologia de equivalência geométrica simples adotada, uma vez que a solução analítica, obtida por meio da equação clássica de velocidade terminal formulada para partículas esféricas, superestimou a velocidade terminal. Conclui-se que o FDS é uma ferramenta robusta para partículas esféricas e cilíndricas, porém sua aplicação a partículas não esféricas exige cautela e a adoção de correções geométricas adequadas.

Palavras-chave: Particulados. Dispersão. CFD. Simulação. Verificação.

MACHADO, J. W. M. **Verification of the Fire Dynamics Simulator for Particle Dispersion Studies**. 2026. 74 f. Graduate Work (Graduate in Chemical Engineering) – Curso de Engenharia do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2026.

ABSTRACT

The intensification of environmental regulations and the ongoing debate on climate change have driven the demand for accurate tools to assess pollutant dispersion, particularly with regard to particulate matter (PM_{2,5} and PM₁₀). Given the complexity of these phenomena and the difficulty of experimental reproduction, Computational Fluid Dynamics has emerged as a widely employed computational tool. This study aimed to verify the applicability of the Fire Dynamics Simulator (FDS) for investigating the dispersion of solid particle in air by assessing the ability of the FDS solver to predict the drag coefficients and terminal velocities of spherical, cylindrical, and discoidal particles, modeled through projected-area equivalence based on aerodynamic diameters of 5 μm and 50 μm . The comparison between numerical results and analytical solutions showed good agreement in the prediction of the drag coefficient, with relative errors below 5%, although greater dispersion was observed in the Stokes regime, particularly for smaller particles, indicating higher numerical sensitivity in viscous-dominated flows. In contrast, greater model robustness was observed in the transitional regime. Regarding terminal velocity, FDS demonstrated consistent performance for spherical and cylindrical particles, with errors on the order of 1%, however, for discoidal particles, a pronounced systematic discrepancy of approximately 70% was observed, characterized by strong linearity and low standard deviations. The observed data do not support the hypothesis of numerical error and indicate a limitation associated with the simple geometric equivalence methodology adopted. This occurs because the analytical solution, obtained from the classical terminal velocity equation formulated for spherical particles, overestimated the terminal velocity. It is concluded that FDS is a robust and reliable tool for spherical and cylindrical particles, whereas its application to non-spherical particles requires caution and the adoption of appropriate geometric correction factors.

Keywords: Particulate Matter. Dispersion. Verification. CFD.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comparação de tamanho entre diferentes tamanhos de material particulado	5
Figura 2 – Impactos da inalação de MP _{2,5} no sistema respiratório	6
Figura 3 – Emissão atmosférica na região do polo industrial de São Luís – MA	6
Figura 4 – Particulados em suspensão em região de mineração a céu aberto	7
Figura 5 – Esquema dos diferentes tipos de acoplamento na modelagem do escoamento bifásico gás-sólido	12
Figura 6 – Cenário para análise do coeficiente de arraste	29
Figura 7 – Cenário para verificação da velocidade terminal da partícula	33
Figura 8 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Esféricas.....	39
Figura 9 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Cilíndricas.....	39
Figura 10 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Discoidais.....	40
Figura 11 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Esféricas	41
Figura 12 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Cilíndricas.....	42
Figura 13 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Discoidais	43
Figura 14 – Erro relativo médio e desvio padrão para partículas de diâmetro equivalente igual a 5 μm	44
Figura 15 – Erro relativo médio e desvio padrão para partículas de diâmetro equivalente igual a 50 μm	45
Figura 16 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Esféricas	46
Figura 17 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Cilíndricas	47
Figura 18 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Discoidais	48
Figura 19 – Erros relativos e desvios-padrão para a determinação das velocidades terminais da partícula.....	49

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dimensões equivalentes para as diferentes geometrias	27
Tabela 2 – Reynolds amostral no regime de Stokes.....	29
Tabela 3 – Reynolds amostral no regime de Transição.....	29
Tabela 4 – Tabela resumo do modelo para verificação do coeficiente de arrasto.....	30
Tabela 5 – Coeficientes de arraste amostrais de entrada	34
Tabela 6 – Tabela resumo do modelo para verificação da velocidade terminal da partícula..	35

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Correlações para o diâmetro equivalente	10
Quadro 2 – Equações gerais do modelo Euleriano-Euleriano	13
Quadro 3 – Equações gerais do modelo Euleriano-Lagrangiano	15
Quadro 4 – Forças atuantes sobre a partícula e coeficiente de arraste em regime de Stokes	17
Quadro 5 – Descrição física da expressão da força de arraste (equação 2)	19
Quadro 6 – Descrição física dos termos das expressões de conservação de momento e da equação de Poisson (equações 3 e 4)	20
Quadro 7 – Descrição física dos termos dos métodos preditor e corretor (equações 5 e 6) ...	22
Quadro 8 – Dimensões de partículas de referência	25
Quadro 9 – Leis de arraste para partículas lagrangianas adotadas pelo FDS	31

SUMÁRIO

	FOLHA DE APROVAÇÃO.....	ii
	DADOS CURRICULARES.....	iii
	DEDICATÓRIA.....	iv
	AGRADECIMENTOS.....	v
	EPÍGRAFE.....	vi
	RESUMO.....	vii
	ABSTRACT.....	viii
	LISTA DE FIGURAS.....	ix
	LISTA DE TABELAS.....	x
	LISTA DE QUADROS.....	xi
	SUMÁRIO.....	xii
1	INTRODUÇÃO.....	1
2	OBJETIVOS.....	3
2.1	Objetivos gerais.....	3
2.2	Objetivos específicos.....	3
3	REFERENCIAL TEÓRICO	4
3.1	IMPACTOS AMBIENTAIS DA EMISSÃO DE MATERIAL PARTICULADO.....	4
3.1.1	Escoamentos Bifásicos Gás-Sólido.....	7
3.1.2	Emissões de particulados em atividades de mineração.....	8
3.1.3	Emissões de particulados em áreas urbanas.....	8
3.2	MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO DE PARTÍCULAS..	8
3.2.1	Fase Contínua e Fase Dispersa.....	9
3.2.2.1	Caracterização geométrica: Esfericidade e Diâmetro Equivalente.....	9
3.2.3	Acoplamento entre Fases.....	10
3.2.4	Abordagem Euleriana-Euleriana.....	12
3.2.4.1	Limitações em sistemas diluídos.....	14
3.2.5	Abordagem Euleriana-Lagrangiana.....	14
3.2.5.1	Velocidade Relativa e Tempo de Relaxação.....	16
3.2.5.2	Força de Arraste e Termos Transientes.....	16
3.3.	O CÓDIGO COMPUTACIONAL <i>FIRE DYNAMIC SIMULATOR</i> (FDS)....	18

3.3.1	Implementação da Fase Dispersa e Termos de Acoplamento.....	18
3.3.2	Equações de Conservação e Campo de Pressão.....	19
3.3.3	Tratamento Numérico das Fronteiras e Paredes.....	21
3.3.4	Lacunas na Literatura.....	23
4	METODOLOGIA.....	25
4.1	DEFINIÇÃO DA EQUIVALÊNCIA DIMENSIONAL ENTRE AS GEOMETRIAS.....	25
4.2	VERIFICAÇÃO DO ARRASTE.....	27
4.2.1	Definição da malha e do domínio.....	27
4.2.2	Condições de contorno.....	28
4.2.3	Definição do problema e condições iniciais.....	28
4.2.4	Verificação analítica.....	31
4.3	VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL DA PARTÍCULA.....	32
4.3.1	Definição da malha e do domínio.....	32
4.3.2	Condições de contorno.....	33
4.3.3	Definição do problema e condições iniciais.....	34
4.3.4	Verificação analítica.....	36
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	38
5.1	VERIFICAÇÃO DO COEFICIENTE DE ARRASTO.....	38
5.2	VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL.....	46
6	CONCLUSÃO.....	51
	REFERÊNCIAS.....	53
	APÊNDICE A - ALGORITMO USADO PARA VERIFICAÇÃO DO CÁLCULO DO COEFICIENTE DE ARRASTE	59
	APÊNDICE B - ALGORITMO USADO PARA VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL DA PARTÍCULA	60

1 INTRODUÇÃO

Recentemente, as discussões sobre mudanças climáticas têm intensificado o debate acerca do enfrentamento de novos cenários ambientais desafiadores, o que tem implicado maior regulação e controle das atividades humanas. Nesse contexto, a poluição do ar, resultante principalmente de atividades antropogênicas, destaca-se como um fator de risco relevante associado ao desenvolvimento de doenças não transmissíveis, as quais são responsáveis por uma parcela expressiva da mortalidade prematura em escala global (*WHO Global, Geneva: WHO* apud Atuyambe *et al.*, 2024).

Além dos poluentes gasosos, como CO e CO₂, destacam-se os materiais particulados (PM), classificados de acordo com o diâmetro aerodinâmico equivalente, como PM_{2,5} e PM₁₀, amplamente utilizados como indicadores regulatórios da qualidade do ar e estabelecidos como padrões de monitoramento ambiental pela Resolução CONAMA nº 491/2018. Quando presentes em concentrações superiores aos limites legais, os materiais particulados tornam-se prejudiciais à saúde humana. Nesse sentido, estudos de dispersão associados ao monitoramento da qualidade do ar permitem prever regiões de maior concentração e propagação de poluentes, fornecendo subsídios para estratégias de mitigação de impactos ambientais e de exposição humana, especialmente em áreas de intensa atividade antrópica, como regiões de mineração.

Um dos principais desafios para a compreensão das interações entre partículas e a atmosfera reside na dificuldade de reproduzir experimentalmente condições reais de dispersão, em razão da elevada variabilidade dos parâmetros fluidodinâmicos envolvidos. Entre esses parâmetros destacam-se os diferentes regimes de escoamento turbulento, as interações fluido-partícula, as forças de arraste e os efeitos gravitacionais, que atuam de forma simultânea e acoplada. Essa complexidade torna a realização de experimentos representativos particularmente onerosa e tecnicamente desafiadora, sobretudo quando se busca reproduzir cenários em escala real.

Nesse contexto, Mouilleau e Champassith (2009) apresentaram um estudo no qual foram utilizados dados provenientes de experimentos de larga escala, conduzidos por grandes instituições, com o objetivo de validar modelos numéricos de dispersão de gases. Os autores utilizaram, por exemplo, os testes Falcon, realizados pelo *Lawrence Livermore National Laboratory*, e o *Mock Urban Setting Trial*, conduzido nos Estados Unidos com o apoio de diversas instituições nacionais e internacionais. Esses estudos evidenciam que experimentos dessa magnitude demandam elevados investimentos financeiros e infraestrutura altamente especializada. Nesse sentido, ferramentas baseadas em fluidodinâmica computacional tornam-

se fundamentais para a análise, compreensão e previsão de fenômenos de dispersão de particulados em cenários complexos, muitas vezes inviáveis de serem reproduzidos experimentalmente

O *Fire Dynamic Simulator* (FDS), é um software computacional desenvolvido pelo Instituto Nacional de Padrões e Tecnologias (NIST) dos Estados Unidos que utiliza modelos de CFD para análise de cenários de incêndio (McGrattan *et al.*, 2024). Embora seu principal foco seja a simulação de cenários de incêndio, o FDS incorpora uma abordagem lagrangiana para o rastreamento individual de partículas, permitindo a modelagem de sua trajetória a partir do balanço de forças, como arraste, gravidade e interação com o escoamento. Levantamentos realizados em bases de dados científicas, como Springer Nature, Nature e ScienceDirect, indicam uma lacuna na literatura no que se refere ao uso do FDS especificamente para a dispersão atmosférica de partículas sólidas. Portanto, investigar este potencial permitirá a sugestão de uma nova opção de ferramenta para a área, gratuita e com código aberto, garantindo acessibilidade e melhorias futuras para a ferramenta utilizada.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

O presente estudo visa verificar a aplicabilidade do FDS, um software de fluidodinâmica computacional, para estudos de dispersão de partículas sólidas.

2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar modelos de partículas esféricas, cilíndricas e discoidais com dimensões equivalentes, fundamentadas em tamanhos característicos de particulados reais ou em normas de monitoramento ambiental;
- Verificar a previsão do coeficiente de arraste do software para as geometrias selecionadas em diferentes faixas de escoamento e tamanho;
- Verificar a determinação da velocidade terminal para as geometrias selecionadas em diferentes tamanhos de partículas.

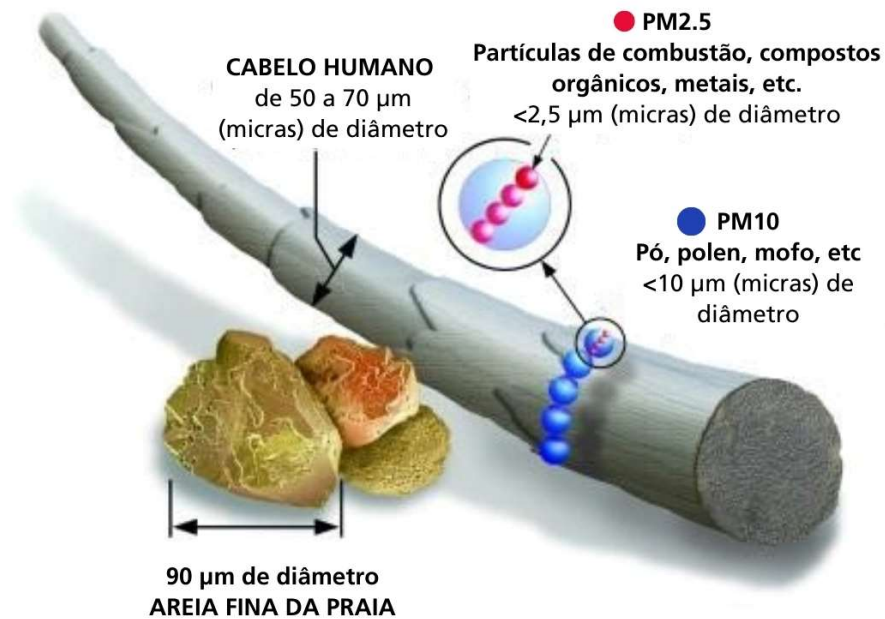
3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 IMPACTOS AMBIENTAIS DA EMISSÃO DE MATERIAL PARTICULADO

Avaliações globais conduzidas pela Organização Mundial da Saúde (2016) identificam a poluição do ar como a maior ameaça ambiental à saúde humana, estando associada a milhões de mortes prematuras anualmente. Evidências consolidadas indicam que os principais desfechos relacionados à exposição ao material particulado incluem doenças cardiovasculares e respiratórias, que respondem pela maior parcela da mortalidade atribuída à poluição atmosférica em escala global (*WHO*, 2018a, 2018b, 2018c.). Estudos epidemiológicos consolidados também indicam que a exposição ao material particulado fino está associada a efeitos adversos à saúde mesmo em concentrações relativamente baixas, típicas de ambientes urbanos e industriais, não se restringindo a episódios extremos de poluição atmosférica (Shy, 1979; Ware, 1981).

No Brasil, o enfrentamento desse desafio no âmbito da legislação ambiental é regido pela Resolução CONAMA nº 491/2018. Esta normativa define os padrões de qualidade do ar e estabelece limites de controle para partículas inaláveis (MP_{10}) e material particulado fino ($MP_{2,5}$). Partículas com diâmetro aerodinâmico da ordem de 10 μm apresentam dimensões comparáveis à espessura de um fio de cabelo humano, sendo capazes de se depositar sobre sua superfície, enquanto partículas finas de 2,5 μm podem se sobrepor às MP_{10} e penetrar com maior eficiência nas vias respiratórias inferiores. Essa diferença de escala geométrica e de comportamento deposicional justifica o controle regulatório específico dessas frações, uma vez que partículas menores permanecem mais tempo em suspensão e apresentam maior potencial de impacto à saúde humana (Figura 1). Ao estipular metas intermediárias e padrões finais alinhados a diretrizes internacionais, a resolução consolida um instrumento legal de controle de emissões, reforçando institucionalmente a importância do monitoramento e da gestão da poluição particulada no país (BRASIL, 2018).

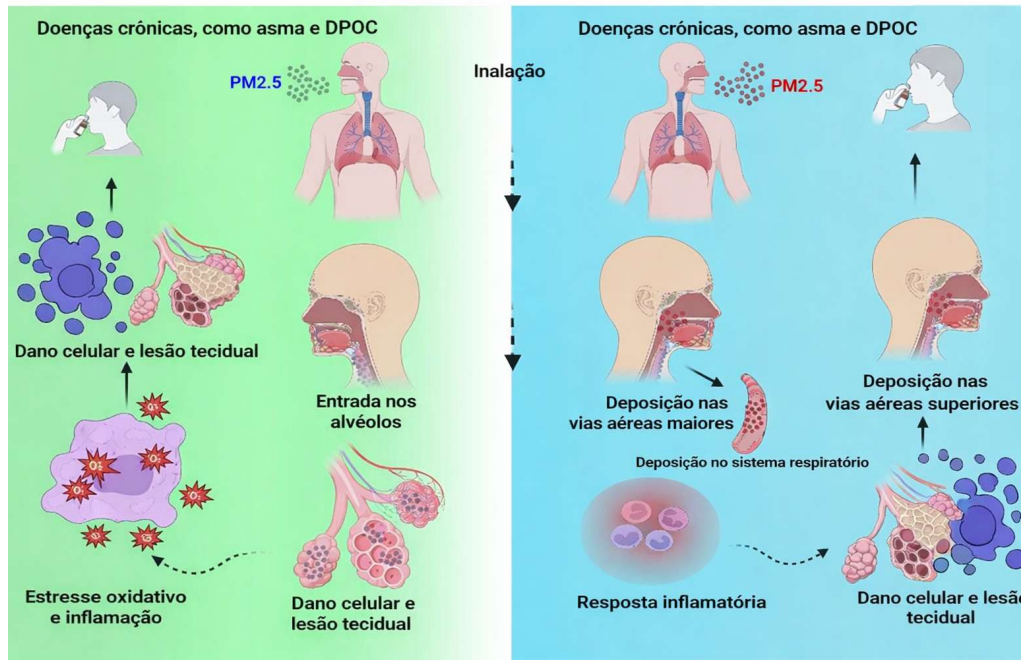
Figura 1 – Comparação de tamanho entre diferentes tamanhos de material particulado.



Fonte: EPA (s.d.) apud AgSolve (2024)

Para a efetiva proteção estabelecida pelas normas, a compreensão da dispersão atmosférica desempenha papel central, pois é ela que determina a exposição humana e ambiental aos poluentes. As partículas finas, especialmente aquelas com diâmetro aerodinâmico inferior a 2,5 μm apresentam maior tempo de permanência em suspensão e elevada capacidade de transporte a longas distâncias, além de um maior potencial de penetração profunda no sistema respiratório (Figura 2). Essas características físico-químicas fazem com que os danos ambientais ultrapassem os limites imediatos das fontes emissoras, estendendo-se a áreas residenciais e regiões sensíveis distantes do ponto de geração (Pope III e Dockery, 2006).

Figura 2 – Impactos da inalação de $MP_{2,5}$ no sistema respiratório.



Fonte: Joshi, *et al.* (2025)

3.1.1 Emissões de particulados em atividades industriais

Nesse contexto de riscos associados à dispersão, as atividades industriais figuram entre as principais fontes antropogênicas, sobretudo aquelas vinculadas a processos de combustão e transformação de energia (Figura 3). Mesmo após a adoção de sistemas de abatimento, processos industriais geram partículas primárias que são parcialmente liberadas para a atmosfera, degradando a qualidade do ar em escalas local e regional (Lagzi *et al.*, 2013).

Figura 3 – Emissão atmosférica na região do polo industrial de São Luís – MA.



Fonte: Adaptado de G1 (2025)

A avaliação dos impactos dessas emissões é tradicionalmente baseada em inventários que utilizam fatores médios para condições típicas. No entanto, tais abordagens apresentam limitações ao não capturar variações locais associadas à geometria dos processos, às condições do escoamento e às propriedades das partículas (EEA, 2023). Isso evidencia que a simples quantificação das emissões não é suficiente para caracterizar o impacto ambiental, exigindo a análise detalhada dos mecanismos físicos de transporte citados anteriormente.

3.1.2 Emissões de particulados em atividades de mineração

Outro setor crítico é a mineração a céu aberto, que apresenta níveis de poluição significativamente superior aos observados em operações subterrâneas (Figura 4). A extração, manuseio e transporte de grandes volumes de material resultam em emissões fugitivas intensas, fortemente dependentes das condições de vento e da dinâmica do escoamento atmosférico. Estudos experimentais indicam concentrações de particulados frequentemente superiores aos níveis recomendados para a proteção da saúde. Observa-se, ainda, um padrão de deposição distinto: enquanto partículas grossas se depositam nas proximidades da lavra, as partículas finas – de maior risco respiratório – tendem a dominar em regiões mais afastadas (Ghose e Majee, 2007). Esse comportamento reforça que a dispersão atmosférica governa a extensão espacial do impacto da mineração, tornando imprescindível a análise dos processos aerodinâmicos envolvidos.

Figura 4 – Particulados em suspensão em região de mineração a céu aberto.



Fonte: TECAM Group (2021)

3.1.3 Emissões de particulados em áreas urbanas

O ciclo de impacto dessas fontes culmina nas áreas urbanas, onde a poluição assume caráter preocupante devido à densidade populacional e à multiplicidade de emissores (Landrigan *et al.*, 2018). Nesse cenário, destacam-se não apenas as emissões de exaustão do tráfego veicular, mas também as emissões não exaustivas, como a ressuspensão de poeira das vias, que representam uma parcela significativa do material particulado inalável (Harrison *et al.*, 2012; Karagulian *et al.*, 2015). O cenário global indica que apenas uma pequena parcela da população urbana está exposta a níveis de qualidade do ar compatíveis com as diretrizes de proteção à saúde (WHO, 2016).

Embora existam padrões nacionais de qualidade do ar, estudos epidemiológicos alertam que análises baseadas apenas em médias espaciais amplas podem subestimar a exposição real, especialmente em regiões próximas a fontes locais ou em ambientes com ventilação limitada (Pope III e Dockery, 2006). A complexidade do escoamento do ar nas cidades reitera, portanto, a importância de abordagens que considerem a dispersão em escala local para subsidiar avaliações realistas do impacto sanitário.

3.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO DE PARTÍCULAS

Uma vez compreendida a magnitude dos impactos ambientais causados pela emissão de material particulado, torna-se imperativo entender os mecanismos físicos que governam o transporte desses poluentes na atmosfera. A capacidade de prever a trajetória e a concentração de contaminantes é fundamental para o desenvolvimento de estratégias de controle e mitigação. Para tanto, recorre-se à modelagem matemática, que traduz os fenômenos físicos de transporte em equações que descrevem a dinâmica do sistema.

3.2.1 Escoamentos Bifásicos Gás-Sólido

Do ponto de vista da mecânica dos fluidos, a dispersão de partículas sólidas no ar classifica-se como um problema de escoamento multifásico. Estes escoamentos definem-se pela coexistência e interação dinâmica de duas ou mais fases fisicamente distintas em um mesmo domínio, onde cada fase preserva suas propriedades individuais. Especificamente no contexto da poluição atmosférica, trata-se de um escoamento gás-sólido, no qual as partículas encontram-se imersas em um fluido gasoso que atua como meio de transporte, configurando um sistema presente tanto em processos naturais quanto industriais (Loth, 2023).

A modelagem desses sistemas apresenta uma complexidade inerente, decorrente da necessidade de relacionar, simultaneamente, o comportamento contínuo do fluido e a dinâmica discreta das partículas. Conforme destacado na literatura, a representação adequada desses fenômenos exige a definição clara das equações governantes para cada fase, bem como a elucidação dos mecanismos de troca de quantidade de movimento entre o fluido e os sólidos (Marchioli *et al.*, 2025). Essas interações são as variáveis determinantes para a previsão correta da trajetória, da velocidade terminal e, conseqüentemente, da dispersão espacial das partículas.

3.2.2 Fase Contínua e Fase Dispersa

Para a estruturação dos modelos matemáticos em escoamentos gás-sólido, estabeleceu-se uma distinção fundamental entre os componentes do sistema. O ar é definido como a fase contínua, visto que ocupa a maior parte do volume do domínio e estabelece o campo de escoamento predominante. As partículas sólidas, por sua vez, constituem a fase dispersa, distribuídas no interior do fluido sob a forma de entidades discretas. Essa diferenciação é crucial para a formulação dos modelos numéricos, pois cada fase exibe um comportamento dinâmico distinto, demandando tratamentos matemáticos específicos (Michaelidis *et al.*, 2017).

Enquanto a fase contínua é descrita por campos de velocidade e pressão, a fase dispersa caracteriza-se por elementos com propriedades próprias – como tamanho, densidade, forma geométrica e inércia – que governam sua resposta às forças aerodinâmicas (Loth, 2023). Diferentemente do fluido, as partículas podem ser tratadas individualmente (abordagem Lagrangiana), tendo suas trajetórias determinadas pelo balanço de forças a que são submetidas.

Essa diferença de natureza física implica que as partículas nem sempre acompanham fielmente as linhas de corrente do fluido. Dependendo de sua inércia, elas podem apresentar deslizamento relativo, sedimentação gravitacional ou desvios de trajetória significativos (Rhodes, 2008), o que torna a modelagem do acoplamento entre as fases um desafio central.

3.2.2.1 Caracterização geométrica: Esfericidade e Diâmetro Equivalente

Embora a maioria das equações fundamentais de mecânica dos fluidos seja derivada para corpos esféricos perfeitos, as partículas encontradas em aplicações ambientais e industriais – como fuligem, poeira e cinzas – apresentam morfologias complexas e irregulares (Ribeiro, 2016). Para viabilizar o tratamento matemático desses sólidos na abordagem multifásica, recorre-se ao conceito de diâmetro equivalente.

O diâmetro equivalente consiste na substituição da geometria real da partícula irregular por uma esfera hipotética que conserve uma propriedade física de interesse, como o volume (diâmetro volumétrico) ou a área superficial (diâmetro superficial). No contexto da dispersão atmosférica, o parâmetro mais relevante é o diâmetro aerodinâmico, definido como o diâmetro de uma esfera de densidade unitária (1 g/cm^3) que apresenta a mesma velocidade terminal de sedimentação que a partícula irregular considerada (Hinds, 1999).

Essa simplificação é crucial para a modelagem numérica, pois permite a utilização de correlações padrão de coeficiente de arrasto. Contudo, para partículas com desvios significativos da forma esférica, a literatura indica a aplicação de fatores de correção baseados na esfericidade, definida como a razão entre a área superficial de uma esfera de mesmo volume e a área superficial real da partícula (McCabe; Smith; Harriott, 1993). A correta definição do diâmetro equivalente e do fator de forma impacta diretamente o cálculo das forças interfaciais e, conseqüentemente, a precisão na predição das trajetórias. A Quadro 1 resume apresenta algumas correlações para o diâmetro equivalente presentes na literatura.

Quadro 1 – Correlações para o diâmetro equivalente.

Símbolo	Nome	Definição	Equação
d_v	diâmetro volumétrico	diâmetro de uma esfera que tem o mesmo volume da partícula.	$V = \frac{\pi}{6} d_v^3$
d_s	diâmetro superficial	diâmetro de uma esfera que tem a mesma área superficial da partícula.	$S = \pi d_s^2$
d_{sv}	Diâmetro volumétrico superficial	diâmetro de uma esfera que tem a mesma relação área superficial por volume que a partícula.	$d_{sv} = \frac{d_v^3}{d_s^2} = \frac{6V}{S}$

Fonte: Allen, 1990.

3.2.3 Acoplamento entre Fases

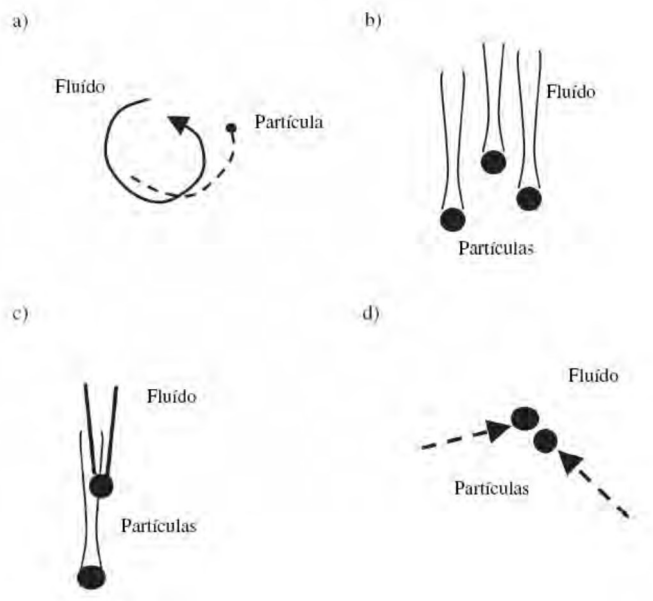
Segundo Crowe *et al.* (2011), o acoplamento entre fases é um conceito fundamental na modelagem de escoamentos multifásicos, resultando das interações dinâmicas entre a fase

contínua e a fase dispersa, operadas principalmente via transferência de quantidade de movimento, calor e massa. A magnitude dessas interações define regimes distintos que orientam diretamente a escolha do método numérico a ser adotado.

Em escoamentos gás-sólido com baixa concentração (fase diluída), assume-se o acoplamento unidirecional (*one-way coupling*), no qual o movimento das partículas é governado pelo arraste do fluido sem perturbar significativamente o campo de escoamento (Figura 5a). Com o aumento moderado da concentração, a fase dispersa passa a modificar o comportamento do fluido, caracterizando o acoplamento bidirecional (*two-way coupling* - Figura 5b). Para estes cenários diluídos, a literatura preconiza o uso da abordagem Euleriana-Lagrangiana, pois a baixa fração volumétrica de sólidos permite o rastreamento individual das partículas com custo computacional aceitável (Subramaniam, 2013).

Por outro lado, em regimes mais complexos associados a escoamentos densos, as interações fluido-partícula-partícula (Figura 5c) e as colisões diretas partícula-partícula (Figura 5d) tornam-se predominantes (*four-way coupling*). Nesse contexto, caracterizado pela relevância das colisões e efeitos de grupo, a técnica de rastreamento individual demanda recursos de processamento excessivos, limitando sua exequibilidade. Consequentemente, opta-se frequentemente pela abordagem Euleriana-Euleriana, na qual ambas as fases são tratadas como contínuos interpenetrantes, permitindo a resolução média das equações de transporte para altas concentrações de particulado (Gidaspow, 1994; Ishii & Hibiki, 2011; Van Wachem e Almstedt, 2003).

Figura 5 – Esquema dos diferentes tipos de acoplamento na modelagem do escoamento bifásico gás-sólido.



Fonte: Luna (2009) modificado de Crowe (2006).

3.2.4 Abordagem Euleriana-Euleriana

Em escoamentos multifásicos, a abordagem Euleriana-Euleriana — também conhecida como *Two-Fluid Model* (TFM) — fundamenta-se no tratamento matemático de cada fase como meios contínuos e interpenetrantes (Gidaspow, 1994). Sob essa ótica, assume-se que a fase sólida comporta-se como um "pseudo-fluido", o que permite que suas propriedades sejam descritas por campos contínuos de fração volumétrica, densidade e velocidade, de forma análoga à fase fluida.

Consequentemente, conforme descrito por Ranade (2002), as equações de conservação de massa e quantidade de movimento para ambas as fases (gás e sólido) são resolvidas simultaneamente. A validade física dessa abstração está intrinsecamente associada a sistemas com elevada concentração de partículas, nos quais as discontinuidades microscópicas da fase dispersa podem ser estatisticamente suavizadas por meio de médias volumétricas (Gidaspow, 1994).

Na prática, essa formulação resulta em um sistema acoplado de equações diferenciais parciais que dispensa o rastreamento individual de partículas (ver Quadro 2). Em função dessa característica, o modelo é amplamente empregado em processos industriais densos, como leitos fluidizados, colunas de bolhas e reatores multifásicos, onde o número de partículas é suficientemente grande para justificar a descrição contínua (Zhang *et al.*, 2019; Yan *et al.*, 2022;

Dudukovic, 2002). Nessas aplicações, o interesse principal recai sobre grandezas macroscópicas do escoamento – como perfis de velocidade e gradientes de pressão – em detrimento do comportamento discreto dos sólidos.

Quadro 2 – Equações gerais do modelo Euleriano-Euleriano.

Equação	Forma geral	Descrição física
Fração volumétrica ($\varepsilon_g, \varepsilon_s$)	$\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1$	Parâmetro central da abordagem Euleriana-Euleriana. Pondera todas as equações de conservação e governa diretamente os modelos de fechamento, em especial o arraste interfacial, a pressão granular e as viscosidades da fase sólida.
Conservação de massa (fase gasosa)	$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0$	Equação fechada, dependente da correta previsão ε_g .
Conservação de massa (fase sólida)	$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s) - 0$	Determina a distribuição média da fase sólida; erros em ε_s afetam diretamente todos os fechamentos subsequentes.
Quantidade de movimento (gás)	$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} + \mathbf{M}_{gs}$	Fechamento turbulento: modelo RANS (ex.: $k-\varepsilon$), Interação interfacial: termo de arraste dependente de ε_g .
Quantidade de movimento (sólidos)	$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla p_s + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} - \mathbf{M}_{gs}$	Fechamento sólido: baseado na Teoria Cinética do Escoamento Granular, com pressão granular e tensões dependentes de ε_s .

Quadro 2 – Equações gerais do modelo Euleriano-Euleriano.

Arraste interfacial	$\mathbf{M}_{gs} - \beta(\varepsilon_s, \varepsilon_g, Re)(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s)$	Modelo empírico/semiempírico de fechamento. Fortemente dependente da fração volumétrica.
---------------------	--	--

Fonte: Adaptado de Marin; Heyderickx; Vegendla (2011).

3.2.4.1 Limitações em sistemas diluídos

Apesar de sua robustez em escoamentos densos, a abordagem Euleriana-Euleriana apresenta limitações conceituais quando aplicada a regimes diluídos de dispersão. Ao descrever a fase sólida por meio de campos médios, o modelo perde a capacidade de representar trajetórias individuais, a história pregressa das partículas e detalhes da distribuição granulométrica (Nordam, 2023; Zhang e Chen, 2007). Estas informações são, contudo, aspectos essenciais em estudos de transporte de poluentes e particulados na atmosfera.

Adicionalmente, os termos de interação entre fases no modelo TFM dependem fortemente de modelos de fechamento empíricos, especialmente para o arraste e para as tensões da fase sólida (pressão de sólidos e viscosidade granular), o que pode introduzir incertezas significativas na solução numérica (Zhao *et al.*, 2023). Dessa forma, em problemas nos quais a dinâmica individual e a inércia das partículas são preponderantes — como na dispersão atmosférica — torna-se mandatória a adoção da abordagem Euleriana-Lagrangiana.

3.2.5 Abordagem Euleriana-Lagrangiana

De acordo com Decker (2003), o modelo Euleriano-Lagrangiano constitui uma abordagem híbrida que combina a mecânica do contínuo para a fase gasosa com a mecânica clássica de corpos discretos para a fase particulada. Enquanto o campo de escoamento do gás é obtido pela resolução das equações de Navier-Stokes (médias ou filtradas), as partículas são tratadas como entidades pontuais, cujas trajetórias são calculadas individualmente através da integração da Segunda Lei de Newton.

Nesse método, o acoplamento ocorre através das forças aerodinâmicas que o fluido exerce sobre as partículas. Conforme sintetizado no Quadro 3, a força de arraste atua como o principal mecanismo de transferência de quantidade de movimento em escoamentos diluídos,

regime no qual as colisões interparticulares são eventos raros e, portanto, frequentemente desprezadas na modelagem (Crowe et al., 2011; Elghobashi, 1994).

Quadro 3 – Equações gerais do modelo Euleriano-Lagrangiano.

Fase	Equação	Forma geral	Descrição física
Fase contínua (Euleriana)	Continuidade do fluido	$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}) = 0$	Conservação de massa da fase gasosa ou líquida resolvida em malha fixa.
Fase contínua (Euleriana)	Quantidade de movimento (Navier-Stokes)	$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S}_m$	Governa o campo de velocidades do fluido; o termo-fonte \mathbf{S}_m representa o acoplamento com as partículas.
	Termo-fonte de quantidade de movimento	$\mathbf{S}_m = -\sum n_p \mathbf{F}_{fp}$	Reação do arraste e demais forças exercidas pelas partículas sobre o fluido (acoplamento de mão dupla)
Fase dispersa (Lagrangiana)	Equação cinemática da partícula	$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{v}_p$	Atualiza a posição da partícula ao longo do tempo.
	Equação de movimento da partícula	$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \sum \mathbf{F}$	Aplicação da Segunda Lei de Newton à partícula individual.

Fonte: Adaptado de Silva (2006).

3.2.5.1 Velocidade Relativa e Tempo de Relaxação

Uma distinção fundamental entre as fases reside na resposta às mudanças no escoamento. Diferentemente de um elemento de fluido, cuja trajetória é determinada instantaneamente pelo campo de velocidades, a partícula sólida responde de forma retardada às flutuações do escoamento devido à sua inércia. Esse atraso dinâmico resulta em uma velocidade relativa não nula entre a partícula e o fluido transportador (Gouesbet & Berlemont, 1999).

Do ponto de vista físico, a capacidade de uma partícula acompanhar as linhas de corrente é governada pelo seu tempo de relaxação aerodinâmica (τ_p). Segundo Hinds (1999), este parâmetro quantifica o tempo necessário para que uma partícula ajuste sua velocidade a uma nova condição do escoamento fluido (equação 1).

$$\tau_p = \frac{m_p}{3\pi\mu_f d_p C_D} \quad (1)$$

Onde:

- m_p : massa da partícula;
- μ_f : Viscosidade do fluido;
- d_p : diâmetro da partícula;
- C_D : coeficiente de arrasto.

O comportamento dinâmico da fase dispersa é, portanto, controlado pelo balanço entre sua inércia e as forças viscosas. Partículas com elevado tempo de relaxação (alta inércia) tendem a manter sua trajetória original, respondendo lentamente às flutuações turbulentas ("efeito balístico"). Por outro lado, partículas com baixo tempo de relaxação ajustam-se quase instantaneamente ao escoamento, comportando-se como traçadores passivos (Loth, 2023). Essa distinção é crucial para a modelagem da dispersão, pois governa fenômenos de sedimentação, impactação inercial e difusão turbulenta.

3.2.5.2 Força de Arraste e Termos Transientes

Sob a ótica Euleriana-Lagrangiana, a interação fluido-partícula é descrita pela somatória das forças atuantes sobre o corpo discreto. Dentre elas, a força de arraste é

frequentemente a componente predominante. Fenomenologicamente, o arraste representa a resistência imposta pelo fluido ao movimento relativo da partícula, originando-se da combinação entre as tensões de cisalhamento (atrito viscoso) na superfície e a distribuição assimétrica de pressão (arraste de forma) ao redor do corpo (Hoerner, 1965).

A modelagem matemática dessa força depende estritamente do regime hidrodinâmico. Em condições onde o número de Reynolds da partícula é muito baixo ($Re_p \ll 1$), o escoamento é dominado por efeitos viscosos. Nesse regime é válida a lei do arrasto estacionário, onde a força é linearmente proporcional à velocidade relativa, caracterizando o chamado Regime de Stokes. A correção proposta por Oseen (1910) apud Silva (2006) introduziu termos inerciais de baixa ordem, o que resultou em uma leve ampliação da validade do modelo.

Contudo, quando a partícula está sujeita a acelerações significativas, o campo de escoamento ao seu redor não se ajusta instantaneamente. Nesses cenários transientes, surgem forças adicionais associadas à inércia do próprio fluido deslocado e à difusão da vorticidade na camada limite. Estes fenômenos são descritos, respectivamente, pelos termos de massa aparente (ou massa virtual) e pela força de Boussinesq–Basset (termo de história). Conforme detalhado por Boussinesq (1885) e Basset (1888) apud Silva (2006), o termo de história incorpora a dependência da força hidrodinâmica em relação à evolução temporal da aceleração relativa, sendo matematicamente complexo devido à sua natureza integral (Maxey & Riley, 1983).

O Quadro 4 sistematiza as expressões matemáticas para cada um desses mecanismos. Em aplicações práticas de CFD para sistemas gás-sólido, a inclusão desses termos deve ser criteriosa. Devido à grande diferença de densidade entre o ar e as partículas sólidas os termos de massa virtual e Boussinesq–Basset tornam-se frequentemente desprezíveis frente ao arraste estacionário e à gravidade, permitindo simplificações que reduzem o custo computacional sem prejuízo significativo à precisão (Crowe et al., 1998).

Quadro 4 – Forças atuantes sobre a partícula e coeficiente de arraste em regime de Stokes.

Regime	Expressão	Significado físico
Arrasto de Stokes (estacionário)	$F_D = 3\pi\mu_f D_p (U - V_p)$	Resistência viscosa proporcional à velocidade relativa; válida para $Re_p \ll 1$; independente da aceleração

Quadro 4 – Forças atuantes sobre a partícula e coeficiente de arraste em regime de Stokes.

Coeficiente de arraste (Stokes)	$C_D = \frac{24}{Re_p}$	Forma adimensional do arrasto estacionário em regime viscoso
Massa aparente	$F_{MA} = \frac{1}{2} \rho_f V_p \frac{d}{dt} (U - V_p)$	Inércia adicional do fluido acelerado ao redor da partícula
Boussinesq-Basset	$F_{BB} = 6\pi\mu_f D_p^2 \sqrt{\frac{\nu}{\pi}} \int_0^t \frac{d(U - V_p)/d\tau}{\sqrt{t - \tau}} d\tau$	Termo histórico que representa a difusão de vorticidade devido à aceleração não estacionária

Fonte: Adaptado de Silva (2006).

3.3 O CÓDIGO COMPUTACIONAL FIRE DYNAMIC SIMULATOR (FDS)

O Fire Dynamics Simulator (FDS) é um software de dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido pelo *National Institute of Standards and Technology* (NIST), amplamente empregado na simulação de escoamentos de baixa velocidade associados à dispersão de contaminantes, aerossóis e partículas sólidas em meios gasosos. Em termos de arquitetura numérica, o código resolve as equações governantes do escoamento utilizando o Método dos Volumes Finitos (MVF), empregando uma discretização espacial estruturada e integração temporal explícita, conforme detalhado no manual técnico do software (McGrattan, 2024). Essa estrutura permite uma resolução eficiente das variáveis de transporte, servindo de base para a aplicação das leis de conservação descritas a seguir.

3.3.1 Implementação da Fase Dispersa e Termos de Acoplamento

No que tange à modelagem multifásica, o FDS implementa a abordagem Euleriana-Lagrangiana, onde a fase gasosa contínua interage com entidades discretas (partículas). A interação física entre essas fases ocorre por meio de termos de acoplamento introduzidos nas equações de movimento de ambos os meios. No contexto lagrangiano adotado pelo software, a principal força responsável por essa interação é a força de arraste aerodinâmico, cuja formulação sub-malha é apresentada na Equação (2). Essa expressão quantifica a troca de

quantidade de movimento entre o fluido e as partículas não resolvidas pela malha, sendo fundamental para a correta previsão da dinâmica das partículas em suspensão conforme o manual técnico (McGrattan, 2024). A interpretação física dos termos associados à força de arraste aerodinâmico encontra-se detalhada no Quadro 5.

$$\mathbf{f}_b = \frac{1}{V} \sum \left[\frac{\rho}{2} C_d A_{p,c} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}| - \frac{dm_p}{dt} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \right] \quad (2)$$

Quadro 5 – Descrição física da expressão da força de arraste (equação 2)

Expressão matemática	Representação	Descrição física
$\frac{1}{V} \sum$	Média volumétrica	Representa a "densidade de força". Ela soma as forças de todas as partículas dentro da célula e divide pelo volume da célula.
$\frac{\rho}{2} C_d A_{p,c} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \mathbf{u}_p - \mathbf{u} $	Força de Arrasto Aerodinâmico	Representa o atrito físico entre a partícula e o gás.
$\frac{dm_p}{dt} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u})$	Transferência de Momento por variação de massa.	Representa o momento transferido quando a partícula muda de fase (ex.: evaporação).

Fonte: Adaptado de McGrattan, *et al.* (2024).

3.3.5 Equações de Conservação e Campo de Pressão

A formulação Euleriana do escoamento no FDS fundamenta-se na equação de conservação da quantidade de movimento, expressa na Equação (3). Essa relação matemática contempla os efeitos da aceleração local, dos termos convectivos, do gradiente da energia de estagnação e a contribuição da pressão, além de incorporar forças volumétricas associadas ao empuxo gravitacional e à interação com fases dispersas. A descrição física detalhada de cada termo presente nessa equação e os mecanismos responsáveis pela evolução do campo de velocidades no domínio computacional são apresentados no Quadro 6.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} + \nabla H - \tilde{p} \nabla(1/\rho) = \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_0) \mathbf{g} + \mathbf{f}_b + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (3)$$

Para garantir o fechamento do sistema e o atendimento à conservação de massa, o campo de pressão do escoamento é determinado pela solução de uma equação de Poisson, apresentada na Equação (4). Essa equação incorpora o divergente das forças advectivas e difusivas atuantes no escoamento, assegurando a consistência matemática e a estabilidade numérica da solução. A origem física desses termos e seu papel crucial na correção do campo de velocidades para garantir a continuidade são igualmente descritos no Quadro 6.

$$\nabla^2 H = -\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{F}_A + \mathbf{F}_B) \quad (4)$$

Quadro 6 – Descrição física dos termos das expressões de conservação de momento e da equação de Poisson (equações 3 e 4)

Expressão matemática	Representação	Descrição física
$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$	Aceleração local	Representa a variação temporal da velocidade do fluido em cada célula do domínio.
$-\mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}$	Termo rotacional da convecção	Associado aos efeitos rotacionais do escoamento e à presença de vorticidade.
∇H	Gradiente da energia de estagnação	Reúne os efeitos da energia cinética e da pressão sobre o campo de velocidades.
$-\tilde{p} \nabla(1/\rho)$	Termo baroclínico	Representa a geração de vorticidade por gradientes não alinhados de pressão e densidade.
$\frac{1}{\rho}(\rho - \rho_0) \mathbf{g}$	Termo de empuxo	Força gravitacional efetiva responsável pela convecção natural e pela formação de plumas térmicas.

Quadro 6 – Descrição física dos termos das expressões de conservação de momento e da equação de Poisson (equações 3 e 4)

$\frac{1}{\rho} \mathbf{f}_b$	Arrasto de partículas sub-malha	Troca de momento entre o fluido e partículas/gotículas não resolvidas pela malha.
$\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$	Difusão viscosa e turbulenta	Representa a dissipação e difusão de momento por efeitos viscosos e turbulentos, modelados por meio da viscosidade efetiva.
$\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial t}$	Derivada temporal do divergente.	Esse termo mede o quanto a velocidade atual viola a conservação de massa (divergente não nulo). Serve para corrigir o campo de velocidade.
$\nabla \cdot (\mathbf{F}_A + \mathbf{F}_B)$	Divergente de forças	Representa a "fonte" de pressão gerada pelo movimento do fluido. É o divergente dos vetores de força \mathbf{F}_A e \mathbf{F}_B (que incluem advecção e difusão) originários da equação do momento.

Fonte: Adaptado de McGrattan, *et al.* (2024).

3.3.3 Tratamento Numérico das Fronteiras e Paredes

A delimitação do problema físico exige um tratamento robusto nas extremidades do domínio. O tratamento das condições de contorno em paredes sólidas no FDS é realizado por meio de um algoritmo do tipo preditor-corretor. As etapas preditora e corretora desse método são descritas pelas Equações (5) e (6), as quais ajustam iterativamente o campo de pressão até que a componente normal da velocidade seja anulada junto às superfícies (McGrattan, 2024). A descrição física dos termos envolvidos e sua função no processo de correção são apresentadas no Quadro 7.

- Método preditor:

$$F_{x,l,jk}^{n,k} = -\frac{H_{l+1,jk}^{n,k-1} - H_{l,jk}^{n,k-1}}{\delta x} - \frac{u_{l,jk}^* - u_{l,jk}^n}{\delta t} \quad (5)$$

- Método corretor:

$$BXF(J, K) \equiv F_{x,l,jk}^* = -\frac{H_{l+1,jk}^* - H_{l,jk}^*}{\delta x} = -F_{x,l,jk}^* - \frac{u_{l,jk}^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{l,jk}^* - u_{l,jk}^n)}{\frac{\delta t}{2}} \quad (6)$$

Quadro 7 – Descrição física dos termos dos métodos preditor e corretor (equações 5 e 6).

Expressão matemática	Representação	Descrição física
$\frac{H_{l+1,jk}^{n,k-1} - H_{l,jk}^{n,k-1}}{\delta x}$	Gradiente normal da pressão modificada no passo n-1.	Força de pressão exercida pelo fluido na fronteira; é a componente que impulsiona/acelera o fluido na direção normal.
$\frac{u_{l,jk}^* - u_{l,jk}^n}{\delta t}$	Aceleração gerada na etapa preditor (velocidade predita)	Correção da aceleração numérica; representa quanto o fluido “tentou acelerar” antes da correção de pressão e precisa ser compensado pela força da fronteira.
$F_{x,l,jk}^{n,k}$	Força normal aplicada na fronteira	Força efetiva imposta pelo fluido na parede (ou vice-versa), mantendo a condição de contorno (parede fixa ou velocidade prescrita).

Quadro 7 – Descrição física dos termos dos métodos preditor e corretor (equações 5 e 6).

$\frac{u_{I,jk}^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{I,jk}^* - u_{I,jk}^n)}{\frac{\delta t}{2}}$	<p>Aceleração de correção do método de Crank–Nicolson</p>	<p>Ajuste final da velocidade para satisfazer exatamente a condição de contorno prescrita (0 para parede, ou valor imposto para fronteira forçada).</p>
--	---	---

Fonte: Adaptado de McGrattan *et al.* (2024).

Complementarmente, para as fronteiras abertas, o FDS adota uma condição de contorno do tipo Dirichlet, na qual o potencial escalar associado à pressão é imposto diretamente na face externa do domínio. Essa formulação, expressa pela Equação (7), fornece o fechamento matemático da equação de Poisson, permitindo o tratamento consistente de condições de entrada e saída de escoamento conforme o regime local (McGrattan *et al.*, 2024)

$$\text{BXS}(J, K) \equiv H_{\frac{1}{2},jk} = \begin{cases} \frac{\tilde{p}_{\text{ext}}}{\rho_{1,jk}} + \frac{1}{2}(\bar{u}_{1,jk}^2 + \bar{v}_{1,jk}^2 + \bar{w}_{1,jk}^2) & \text{(a)} \\ \frac{\tilde{p}_{\text{ext}}}{\rho_{\infty}} + \frac{1}{2}(u_{\infty}^2 + v_{\infty}^2 + w_{\infty}^2) & \text{(b)} \end{cases} \quad (7)$$

Onde:

- (a): saída de fluxo (variáveis internas extrapoladas);
- (b): entrada de fluxo (campo distante prescrito).

3.4.4 Lacunas na Literatura

Apesar do amplo uso do Fire Dynamics Simulator (FDS) em estudos de cenários de incêndio (McGrattan *et al.*, 2024), observa-se que a maior parte das aplicações concentra-se na validação experimental de grandezas macroscópicas, como campos de temperatura, velocidades e concentrações médias de gases tóxicos (Rinne; Hietaniemi; Hostikka, 2006; Zhang *et al.*, 2008). Diversos autores destacam que, embora o FDS apresente boa concordância qualitativa com medições experimentais, a capacidade do modelo em prever corretamente distribuições espaciais de concentração ainda é pouco explorada, mesmo para espécies gasosas como o

monóxido de carbono, indicando uma lacuna relevante na avaliação sistemática do desempenho do solver (Yuan; Zhou; Smith, 2016; Hu *et al.*, 2007).

Essa limitação torna-se ainda mais evidente em aplicações ambientais e urbanas, nas quais o FDS vem sendo empregado para estudar a dispersão de fumaça e poluentes em geometrias complexas, como canais longos e cânions urbanos. Estudos recentes reconhecem explicitamente que certos parâmetros físicos fundamentais, como a direção do vento e sua interação com fontes fortemente influenciadas pela flutuabilidade (*buoyancy-driven*), não foram plenamente considerados na literatura anterior, o que restringe a generalização dos resultados obtidos e evidencia a necessidade de investigações mais abrangentes (Lu *et al.*, 2023).

Outro aspecto crítico refere-se à dependência dos resultados em relação à configuração numérica, especialmente à resolução de malha. Estudos de validação mostram que desvios superiores a 20% podem ocorrer quando malhas inadequadas são empregadas, mesmo em problemas relativamente simples. Tal sensibilidade evidencia que a concordância com dados experimentais pode ser circunstancial e fortemente condicionada às escolhas numéricas, reforçando a distinção conceitual entre validação e verificação e a necessidade desta última como etapa prévia e independente (Smardz, 2006).

Tentativas de aprimorar a previsão da deposição e sedimentação de partículas no FDS indicam que a melhoria dos resultados depende fortemente da adoção de tamanhos de partículas maiores, muitas vezes incompatíveis com distribuições granulométricas medidas experimentalmente. Tal fato evidencia que a concordância obtida decorre, em parte, de ajustes empíricos de parâmetros, e não de uma verificação física rigorosa das equações de transporte e das forças atuantes sobre a fase particulada (Floyd *et al.*, 2014).

Em síntese, a análise crítica da literatura evidencia que, não obstante a posição consolidada do FDS como ferramenta padrão na engenharia de incêndios, existem lacunas significativas na verificação formal do solver, especialmente para aplicações não convencionais, como a dispersão de partículas sólidas ou aerossóis em ambientes abertos e urbanos. A ausência de estudos que combinem verificação analítica, análise sistemática de erros numéricos e avaliação da sensibilidade a parâmetros físicos limita a confiança nos resultados e justifica a necessidade de investigações específicas voltadas à verificação do modelo Euleriano-Lagrangiano implementado no FDS.

4 METODOLOGIA

4.1 DEFINIÇÃO DA EQUIVALÊNCIA DIMENSIONAL ENTRE AS GEOMETRIAS

Para este estudo, foram simuladas partículas sólidas por meio do modelo lagrangiano do FDS, considerando-se três geometrias ideais: esférica, cilíndrica e discoidal. Reconhecendo que particulados reais apresentam formas irregulares, adotaram-se aproximações geométricas equivalentes, fundamentadas em dados da literatura e em referências normativas (Quadro 8).

Quadro 8 – Dimensões de partículas de referência.

Formato	Dimensão	Referência
Esfera	Diâmetros aerodinâmico equivalente: 5 μm , conforme MP ₅ estabelecido pela Resolução CONAMA 491/2018;	BRASIL (2018)
Cilindro	Diâmetro aerodinâmico equivalente: 5 μm , conforme MP ₅ estabelecido pela Resolução CONAMA 491/2018.	BRASIL (2018)
	Comprimento: 80 microns	Santiago <i>et al.</i> (2015)
Disco	Diâmetro aerodinâmico equivalente: 5 μm , conforme MP ₅ estabelecido pela Resolução CONAMA 491/2018.	BRASIL (2018)
	Espessura: 0,1 micron	Yang <i>et al.</i> (2017).

Fonte: Próprio Autor (2026).

Com o objetivo de possibilitar uma comparação consistente entre as diferentes geometrias, definiu-se um procedimento de equivalência dimensional baseado em grandezas geométricas relevantes para o cálculo do coeficiente de arrasto e da velocidade terminal, assegurando compatibilidade tanto com normas de monitoramento ambiental quanto com dimensões características de partículas reais.

Para a verificação do coeficiente de arrasto e da velocidade terminal, adotou-se como referência o valor de 5 μm , originalmente definido na Resolução CONAMA nº 491/2018 como diâmetro aerodinâmico, mas aqui utilizado como diâmetro equivalente por área projetada para

a definição das geometrias analisadas. A partir desse valor de referência, foi considerado adicionalmente um tamanho de 50 μm , obtido por ampliação artificial, com o objetivo de avaliar o comportamento do solver em diferentes faixas dimensionais. Embora esse último não corresponda diretamente a uma classe normativa específica, ele se insere na faixa de particulados sedimentáveis, conforme classificação apresentada por Hinds (1999).

As dimensões características da geometria esférica foram adotadas como referência para a definição das demais geometrias. Para a geometria cilíndrica, a equivalência dimensional foi estabelecida a partir do diâmetro equivalente por área projetada, considerando que, no FDS, o cálculo das forças aerodinâmicas é baseado na área projetada normal ao escoamento, a qual, para escoamento frontal, corresponde à área de um círculo. Assim, obtém-se que o diâmetro geométrico do cilindro coincide com o diâmetro equivalente por área projetada, resultando em valores idênticos aos adotados para a geometria esférica. Dessa forma, tanto para partículas esféricas quanto cilíndricas, foram utilizados diâmetros de 5 μm e 50 μm na análise do coeficiente de arrasto e da velocidade terminal.

Os comprimentos dos cilindros foram determinados com base nos dados experimentais apresentados por Santiago *et al.* (2015). Para isso, utilizou-se a escala de referência presente nas imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) fornecidas pelos autores, permitindo a estimativa direta por comparação visual. O comprimento utilizado foi de 80 μm (de Santiago *et al.*, 2015) para o diâmetro de 5 μm e 800 μm (expandido proporcionalmente a partir da referência) para o diâmetro de 50 μm , mantendo-se a proporção geométrica.

A geometria discoidal foi definida no FDS também com base no diâmetro aerodinâmico de 5 μm estabelecido pela Resolução CONAMA nº 491/2018 e nos dados geométricos reportados por Yang *et al.* (2017), que sintetizaram nanopartículas de prata com morfologia discoidal semelhante (Quadro 8). No FDS, essa geometria é representada por meio de um comprimento, largura, espessura. A raiz quadrada da área maior define o seu diâmetro hidráulico, que é usado no software para o cálculo de Reynolds da partícula. Assim, o comprimento e a largura do disco (dimensões características no plano) foram determinados por meio da equação (9), que calcula a aresta de um quadrado de área equivalente à área projetada de uma esfera com os diâmetros equivalentes previamente definidos de 5 e 50 μm . As espessuras dos discos foram assumidas iguais aos valores reportados por Yang *et al.* (2017), assegurando coerência com partículas reais observadas experimentalmente, sendo de 0,1 μm e 1 μm . A Tabela 1 resume a equivalência feita entre as geometrias analisadas.

$$L = \frac{d\sqrt{\pi}}{2} \quad (9)$$

Onde:

- d: diâmetro equivalente por área projetada de referência;
- L: aresta do quadrado de área equivalente.

Tabela 1 – Dimensões equivalentes para geometrias de análise.

Dimensão característica	Esfera	Cilindro	Disco
Diâmetro (μm)	5 e 50	5 e 50	-
Largura (μm)	-	-	4,4 e 44
Comprimento (μm)	-	80 e 800	4,4 e 44
Espessura (μm)	-	-	0,1 e 1
Diâmetro equivalente por área projetada (μm)	5 e 50	5 e 50	5 e 50

Fonte: Próprio Autor (2026)

A confiabilidade dos resultados numéricos foi avaliada por meio da verificação da capacidade do software em reproduzir, para cada modelo analisado, resultados analíticos de referência. Esse processo concentrou-se em dois parâmetros fundamentais: a determinação do coeficiente de arrasto aerodinâmico e o cálculo da velocidade terminal. Os valores obtidos computacionalmente para esses parâmetros foram confrontados com soluções analíticas apresentadas no manual técnico do FDS, permitindo avaliar o desempenho do solver para as diferentes geometrias nos tamanhos dimensionais consideradas. A versão do FDS utilizada neste trabalho é a 6.9.1.

4.2 VERIFICAÇÃO DO ARRASTE

4.2.1 Definição da malha e do domínio

Para a verificação do coeficiente de arraste foi utilizado um domínio tridimensional com dimensões de 2,0 m (comprimento) x 1,0 m (largura) x 1,0 m (altura), discretizado por uma malha estruturada com 40 divisões na direção X e 20 divisões nas direções Y e Z, totalizando aproximadamente 16000 células.

4.2.2 Condições de contorno

A condição de não-escorregamento foi desativada nas paredes de modo a evitar a formação de camada limite e garantir escoamento uniforme na seção transversal. A face de entrada (na posição $x = 0$ m) foi configurada com velocidade prescrita do vento, enquanto a face de saída (posição em $x = 2,0$ m) foi definida como fronteira aberta.

4.2.3 Definição do problema e condições iniciais

Foram inseridas partículas estáticas no domínio, posicionadas em células localizadas na região central da seção transversal. As simulações foram realizadas para os diâmetros aerodinâmicos de 5 e 50 μm para as geometrias esférica, cilíndrica e discoide.

A análise do coeficiente de arraste foi conduzida variando-se a velocidade do escoamento incidente sobre as partículas. Foram selecionados 12 valores de número de Reynolds na faixa laminar ($Re \leq 1$) e 12 valores na região de transição com corte em $Re = 200$ ($1 \leq Re \leq 200$), conforme Tabelas 2 e 3. Utilizando os valores de Reynolds, calculou-se as velocidades do vento para cada partícula analisada por meio da equação (10). Os valores obtidos foram utilizados como condições de entrada no cenário base, totalizando 144 simulações (Figura 6).

$$u = \frac{\mu Re_D}{2r_p \rho} \quad (10)$$

Onde:

- μ = viscosidade dinâmica do ar a 25°C [Pa.s];
- r_p = raio característico da partícula [m];
- ρ = densidade do ar a 25°C [kg/m³];
- Re_D = Número de Reynolds ao redor da partícula;
- u = velocidade do vento [m/s].

Tabela 2 – Reynolds amostral no regime de Stokes.

$(Re_D < 1)$											
0,012	0,017	0,03	0,087	0,152	0,235	0,307	0,426	0,561	0,703	0,811	0,93

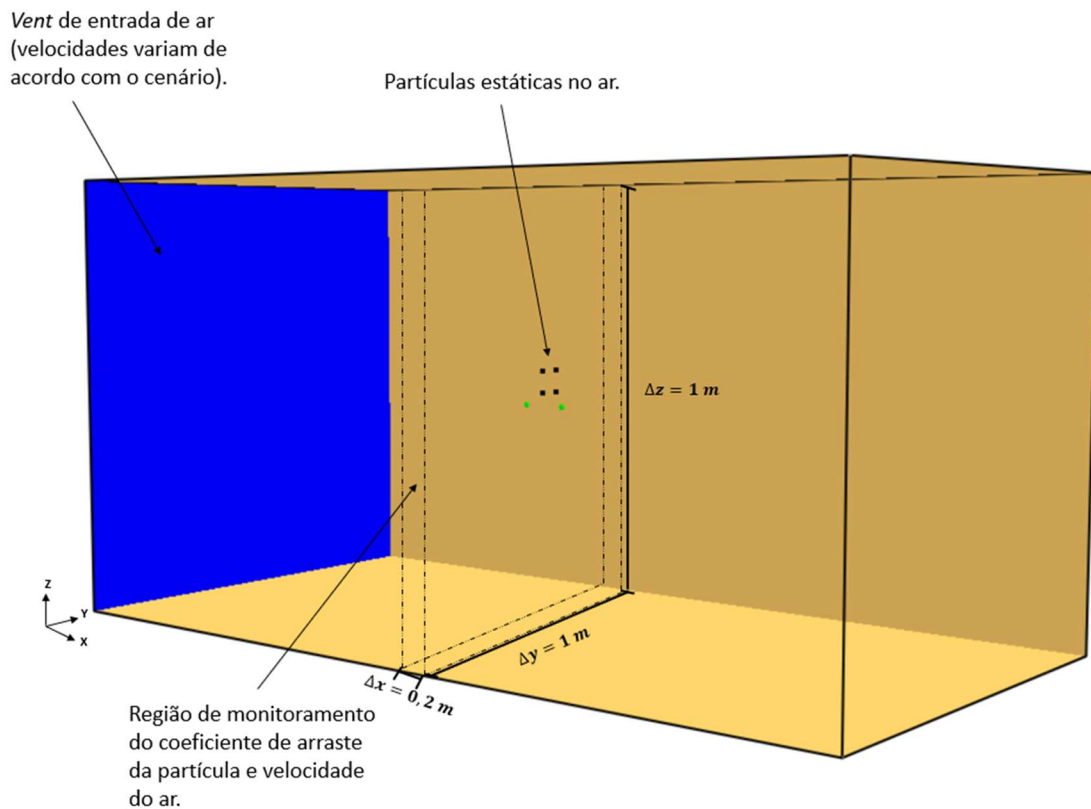
Fonte: Próprio Autor (2026).

Tabela 3 – Reynolds amostral no regime de Transição.

$(1 < Re_D \leq 200)$											
1,06	2,8	5	10	30	50	67	99	125	150	175	198

Fonte: Próprio Autor (2026).

Figura 6 – Cenário para análise do coeficiente de arraste



Fonte: Próprio Autor (2026)

A tabela 4 resume os principais parâmetros do modelo simulado. O código completo desta análise está disponível no Apêndice A.

Tabela 4 – Tabela resumo do modelo para verificação do coeficiente de arrasto.

Categoria	Parâmetro	Notação	Configuração	Unidade
Domínio computacional	Extensão em x, y, z	XB	(0 – 2,0); (0 - 1,0); (0 - 1,0)	m
	Discretização da malha	Nº de células em x, y, z	IJK	40; 20; 20
	Nº de células total	n	16000	–
Condições de contorno	Paredes (y_{\min} , y_{\max} , z_{\min} , z_{\max})	SLIP	Ativado [escorregamento]	–
	Face x_{\max}	OPEN	[fronteira aberta]	–
	Face x_{\min}	VENT	Entrada de escoamento	–
Modelo de partículas	Partículas por célula	N_PARTICLES_PER_CELL	1	–
	Região de inserção (x, y, z)	XB	(0,9–0,9); (0,5–0,6); (0,5–0,6)	m
	Densidade da partícula	DENSITY	1000	kg/m ³
	Geometria da partícula	GEOMETRY	Esférica / Cilíndrica / Cartesiana SPHERE /	–
	Lei de arrasto	DRAG_LAW	CYLINDER / DISK	–
	Raio característico	RADIUS	Conforme Tabela 1	m
Comprimento	LENGTH	Conforme Tabela 1	m	Comprimento

Tabela 4 – Tabela resumo do modelo para verificação do coeficiente de arrasto.

	Largura	WIDTH	Conforme Tabela 1	m
	Espessura	THICKNESS	Conforme Tabela 1	m
Modelo do fluido	Velocidade de entrada	VEL	Conforme Eq. 1	m/s
Dispositivos de medição	Coefficiente de arrasto médio	QUANTITY	PARTICLE DRAG COEFFICIENT	–
	Velocidade do fluido	QUANTITY	U-VELOCITY	m/s
	Região de medição (x, y, z)	XB	(0.7 – 1.1); (0 – 1); (0 – 1)	m

Fonte: Próprio Autor (2026)

4.2.4 Verificação analítica

Os coeficientes de arraste obtidos numericamente foram comparados com valores analíticos calculados a partir das leis de arraste adotadas pelo FDS para cada geometria (Quadro 9). A verificação estatística foi realizada por meio do cálculo do erro percentual médio (equação 11) e do desvio padrão amostral dos erros (equação 12), permitindo avaliar tanto a precisão média quanto a dispersão dos resultados.

Quadro 9 – Leis de arraste para partículas lagrangianas adotadas pelo FDS.

$C_d = \begin{cases} 24/Re_D & Re_D < 1 \\ 24(0.85 + 0.15Re_D^{0.687})/Re_D & 1 < Re_D < 1000 \\ 0.44 & 1000 < Re_D \end{cases}$	Lei de arraste para o formato esférico
$C_d = \begin{cases} 10/Re_D^{0.8} & Re_D < 1 \\ 10(0.6 + 0.4Re_D^{0.8})/Re_D & 1 < Re_D < 1000 \\ 1 & 1000 < Re_D \end{cases}$	Lei de arraste para o formato cilíndrico

Quadro 9 – Leis de arraste para partículas lagrangianas adotadas pelo FDS.

$C_d = \frac{20.37}{Re_D} + \frac{1.17}{1 + 1/Re_D}$	Lei de arraste para o formato disco
--	--

Fonte: Adaptado de McGrattan, *et. al* (2024)

$$\bar{\varepsilon}(\%) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{C_{D,i}^{\text{FDS}} - C_{D,i}^{\text{ana}}}{C_{D,i}^{\text{ana}}} \right| \quad (11)$$

$$\sigma_{\varepsilon} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\varepsilon_i - \bar{\varepsilon})^2} \quad (12)$$

Onde:

- ε_i = erro percentual absoluto;
- $\bar{\varepsilon}(\%)$ = erro percentual médio;
- $C_{D,i}^{\text{FDS}}$ = coeficiente de arraste calculado pelo FDS;
- $C_{D,i}^{\text{ana}}$ = coeficiente de arraste calculado analiticamente;
- σ_{ε} = desvio-padrão do erro percentual;
- N = número da amostra.

4.3 VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL DA PARTÍCULA

4.3.1 Definição da malha e do domínio

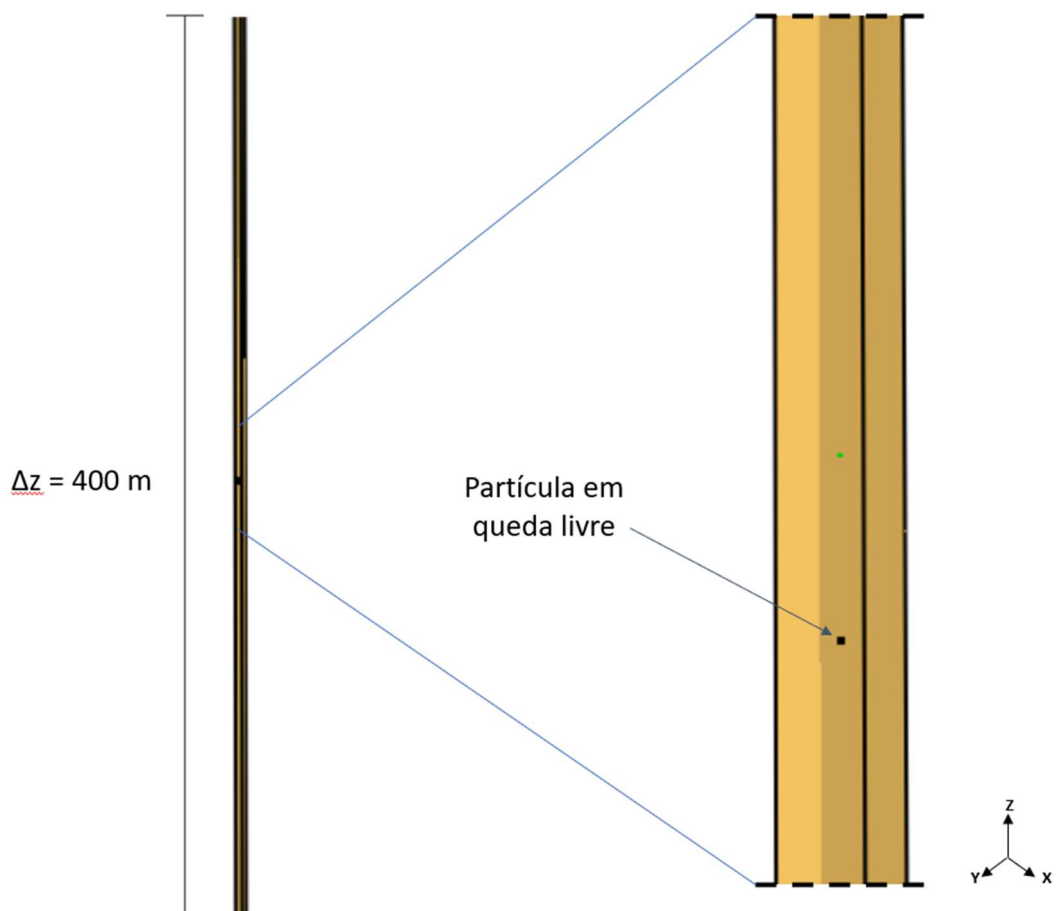
Para a verificação da velocidade terminal foi adotado um domínio tridimensional configurado como um duto vertical de grande extensão, com seção transversal de 1,0 m × 1,0 m e comprimento total de 400 m. O domínio foi discretizado por meio de uma malha estruturada, composta por 4 divisões na direção X, 4 na direção Y e 10 divisões na direção Z, resultando em aproximadamente 160 células.

Considerando que a determinação da velocidade terminal decorre da integração da equação de movimento da partícula, na qual a força de arraste é representada por correlações sub-malha, a resolução espacial do domínio do fluido exerce influência secundária sobre o resultado, razão pela qual foi adotada uma malha suficientemente ampla para minimizar efeitos de confinamento, sem a necessidade de refinamento adicional, uma vez que o escoamento ao redor da partícula não é resolvido explicitamente no modelo Euleriano–Lagrangiano.

4.3.2 Condições de contorno

As condições de contorno do domínio foram definidas de modo a reproduzir um fluido quiescente e eliminar influências externas sobre o movimento da partícula. Os limites laterais x_{\min} , x_{\max} , y_{\min} , y_{\max} do domínio foram configuradas como paredes sólidas, enquanto as faces superior e inferior foram definidas como fronteiras abertas, permitindo a livre movimentação da partícula ao longo da direção vertical (Figura 7).

Figura 7 – Cenário para verificação da velocidade terminal da partícula.



4.3.3 Definição do problema e condições iniciais

Uma única partícula foi inserida no domínio com velocidade inicial nula, sendo submetida exclusivamente à ação da gravidade e da força de arraste aerodinâmico. Foram selecionados 18 valores amostrais do coeficiente de arraste (Tabela 4) para cada geometria, os quais foram impostos individualmente como condição no modelo com o objetivo de determinar as velocidades terminais correspondentes a cada tamanho equivalente, totalizando 108 simulações realizadas.

Tabela 5 – Coeficientes de arraste amostrais de entrada.

Esfera		Cilindro		Disco	
5 μm	50 μm	5 μm	50 μm	4,4 μm	44 μm
275,9		70,5		234,2	
157,9		45,1		134,2	
102,1		31,9		86,9	
78,2		25,7		66,6	
56,3		19,8		48,2	
42,8		15,9		36,7	
34,1		13,3		29,5	
29,6		11,8		25,6	
25,8		10,6		22,5	
9,9		5,4		8,1	
6,3		4,1		5,0	
3,8		3,1		3,1	
1,9		2,2		1,8	
1,5		1,9		1,6	
1,3		1,8		1,5	
1,1		1,7		1,4	
1,0		1,6		1,32	
0,9		1,5		1,30	

Fonte: Próprio Autor (2026).

Com o intuito de evitar retroalimentação do movimento da partícula no campo de escoamento, a velocidade do fluido foi mantida congelada ao longo da simulação.

Adicionalmente, o passo de tempo foi fixado, eliminando variações associadas a esquemas adaptativos e permitindo que o erro numérico fosse atribuído exclusivamente ao método de integração temporal. Um dispositivo foi associado à inserção da partícula monitorando sua velocidade vertical para gerar os outputs. Um dispositivo foi associado à partícula para monitorar sua velocidade vertical e gerar os dados de saída. O tempo de simulação foi conduzido até a completa estabilização da velocidade, sendo da ordem de 100 a 200 s para coeficientes de arraste menores e podendo atingir aproximadamente 10000 s para coeficientes elevados (acima de 100). Os detalhes do código estão disponíveis no Apêndice B.

Tabela 6 – Tabela resumo do modelo para verificação da velocidade terminal da partícula.

Categoria	Parâmetro	Notação	Configuração	Unidade
Domínio computacional	Extensão em x, y, z	XB	(0 – 1,0); (0 –	m
			1,0); (0 – 400,0)	
Discretização da malha	Nº de células em x, y, z	IJK	4; 4; 10	–
	Nº de células total	n	160	–
Condições de contorno	Paredes (y_{min} , y_{max} , x_{min} , x_{max})	INERT	[condição de parede]	–
	Faces z_{min} , z_{max}	OPEN	[fronteira aberta]	–
Modelo de partículas	Nº de partículas inseridas no domínio	N_PARTICLES	1	–
	Região de inserção (x, y, z)	XB	(0 - 0); (0 - 0,); (0 - 0)	m
	Densidade da partícula	DENSITY	1000	kg/m ³

Tabela 6 – Tabela resumo do modelo para verificação da velocidade terminal da partícula.

	Geometria da partícula	GEOMETRY	Esférica / Cilíndrica / Discoide	–
	Coefficiente de arrasto	DRAG_COEFFICIENT	Conforme tabela 5	–
	Raio característico	RADIUS	Conforme Tabela 1	m
	Comprimento	LENGTH	Conforme Tabela 1	m
	Largura	WIDTH	Conforme Tabela 1	m
	Espessura	THICKNESS	Conforme Tabela 1	m
Modelo do fluido	Perfil de velocidade	FREEZE_VELOCITY = .TRUE.	[velocidade do fluido em estado estacionário]	m/s
Dispositivos de medição sobre a partícula	Velocidade vertical	QUANTITY	PARTICLE W	m/s
	Posição da partícula	QUANTITY	PARTICLE Z	m

Fonte: Próprio Autor (2026)

4.3.4 Verificação analítica

A verificação da velocidade terminal foi realizada por meio da comparação entre os valores obtidos numericamente e a solução analítica correspondente (equação 13). Foram calculados o erro relativo médio e o desvio padrão amostral dos erros (equações 14 e 15), permitindo avaliar a precisão e a consistência do modelo para diferentes geometrias e tamanhos de partículas.

$$u_t = \sqrt{\frac{4\rho_d Dg}{3\rho_a C_d}} \quad (13)$$

$$\bar{\varepsilon}(\%) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{u_i^{\text{FDS}} - u_i^{\text{ana}}}{u_i^{\text{ana}}} \right| \quad (14)$$

$$\sigma_\varepsilon = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\varepsilon_i - \bar{\varepsilon})^2} \quad (15)$$

Onde:

- ε_i = erro percentual absoluto;
- $\bar{\varepsilon}(\%)$ = erro percentual médio;
- u_i^{FDS} = velocidade terminal do tamanho geométrico i calculado pelo FDS;
- u_i^{ana} = velocidade terminal do tamanho geométrico i calculado analiticamente;
- σ_ε = desvio-padrão do erro percentual.
- N = Tamanho da amostra.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Esta seção apresenta os resultados obtidos a partir da modelagem numérica da dispersão de partículas sólidas, com foco na avaliação do desempenho do solver do FDS na previsão do coeficiente de arraste e da velocidade terminal, bem como na comparação entre diferentes geometrias a partir dos tamanhos equivalentes definidos na metodologia. Para garantir clareza e coerência na análise, os resultados foram organizados em subtópicos que refletem diretamente os objetivos do estudo.

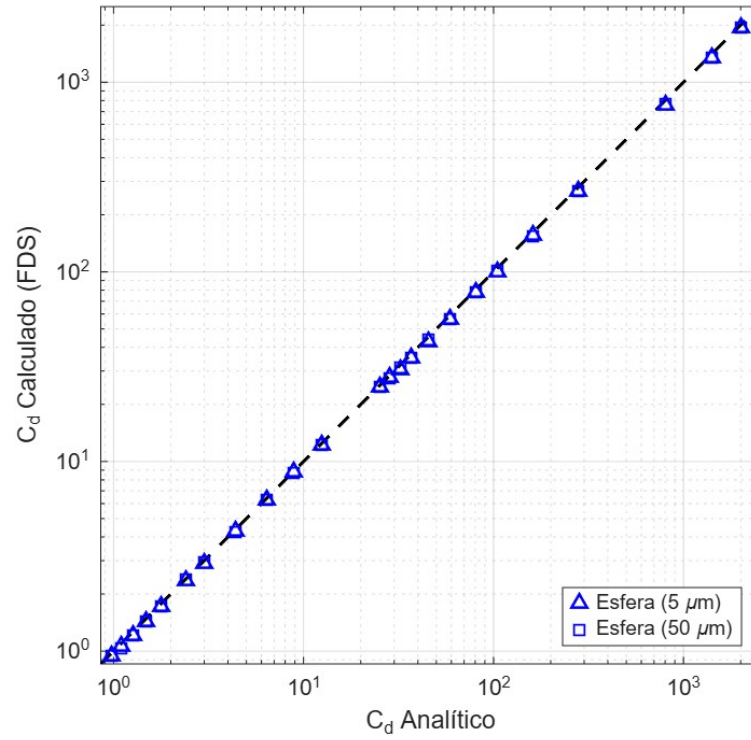
Inicialmente, discute-se a capacidade do solver do FDS em prever o coeficiente de arrasto para diferentes formatos de partículas e tamanhos equivalentes, avaliando-se a consistência das previsões numéricas para esse parâmetro aerodinâmico fundamental. Em seguida, são analisados os comportamentos associados aos erros relativos e à sua variabilidade, considerando a influência do regime de escoamento e do tamanho das partículas. Por fim, a discussão volta-se à capacidade do modelo em prever a velocidade terminal das partículas e, ao longo da seção, é avaliada de forma integrada a efetividade do critério de equivalência entre os diferentes formatos de partículas definido inicialmente, verificando-se em que medida tal abordagem permite comparações consistentes entre as geometrias analisadas.

5.1 VERIFICAÇÃO DO COEFICIENTE DE ARRASTO

As Figuras 8, 9 e 10 apresentam a verificação cruzada entre os coeficientes de arraste calculados pelo solver do FDS e os valores analíticos de referência, por meio de gráficos de paridade (linha de 45°), sendo cada figura dedicada a uma geometria distinta: partículas esféricas (Figura 8), partículas cilíndricas (Figura 9) e partículas discoidais (Figura 10). Em cada caso, são apresentados os resultados correspondentes aos dois tamanhos equivalentes analisados.

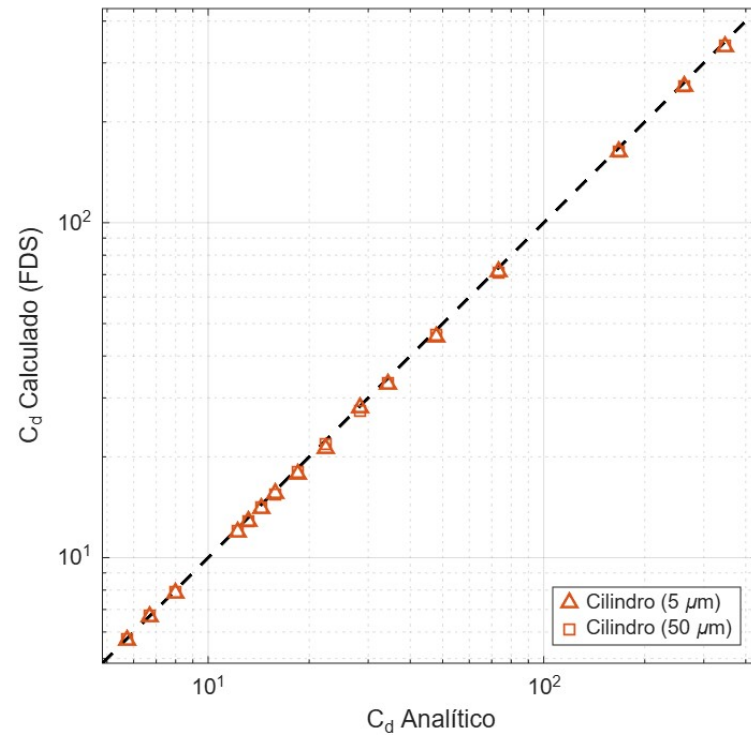
De modo geral, observa-se uma boa concordância entre os valores numéricos e analíticos, evidenciada pela concentração dos pontos em torno da diagonal unitária ($x = y$) nos três gráficos. Esse comportamento indica que, em uma primeira aproximação, o modelo numérico do FDS é capaz de reproduzir adequadamente o equilíbrio entre as forças de arraste e as forças de corpo para as diferentes geometrias e escalas de partículas consideradas.

Figura 8 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Esféricas.



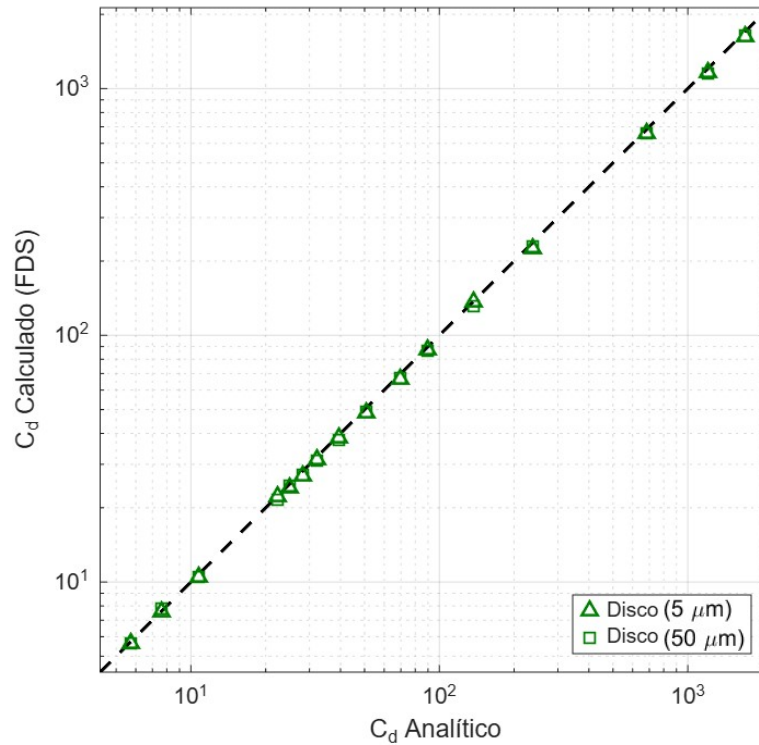
Fonte: Próprio Autor (2026)

Figura 9 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Cilíndricas.



Fonte: Próprio Autor (2026)

Figura 10 – Verificação do Coeficiente de Arraste para Partículas Discoidais

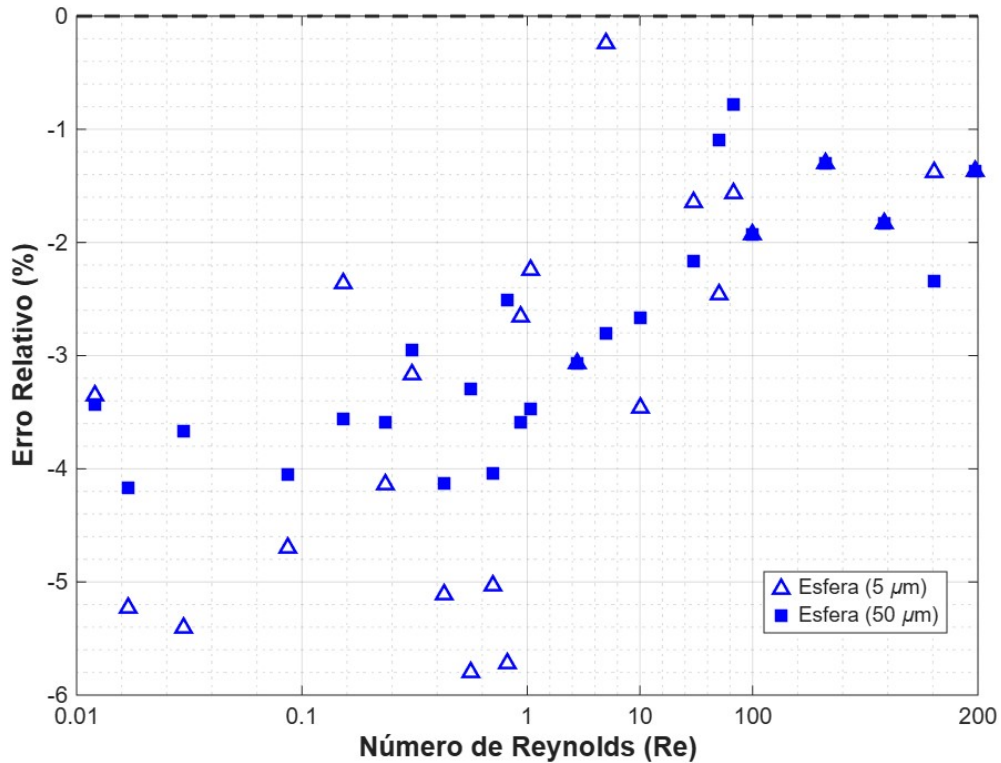


Fonte: Próprio Autor (2026)

A Figura 11 apresenta a dispersão dos erros relativos entre os coeficientes de arraste calculados pelo FDS e os valores analíticos de referência para partículas esféricas. Observa-se que, no regime de Stokes ($Re < 1$), os erros concentram-se majoritariamente entre -4% e -5%, enquanto no regime de transição ocorre uma redução significativa da magnitude dos desvios, com erros predominantemente inferiores a 2%. A predominância de valores negativos ao longo de toda a faixa analisada indica uma tendência sistemática de subestimação do coeficiente de arraste pelo solver para essa geometria.

A análise por tamanho de partícula evidencia que as partículas de 5 μm apresentam maior dispersão dos erros, especialmente no regime de Stokes, com diversos pontos situados abaixo de -4% e alguns ultrapassando -5%. Próximo ao limiar entre os regimes de Stokes e de transição, observa-se uma maior variabilidade, com a coexistência de erros mais acentuados e valores próximos de zero. Em contraste, para partículas de 50 μm , a dispersão é menor e os erros tendem a se concentrar em faixas mais estreitas, situando-se aproximadamente entre -4% e -3% no regime de Stokes e entre -2% e -1% no regime de transição. Esse comportamento sugere maior estabilidade das previsões para partículas de maior tamanho equivalente.

Figura 11 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Esféricas.

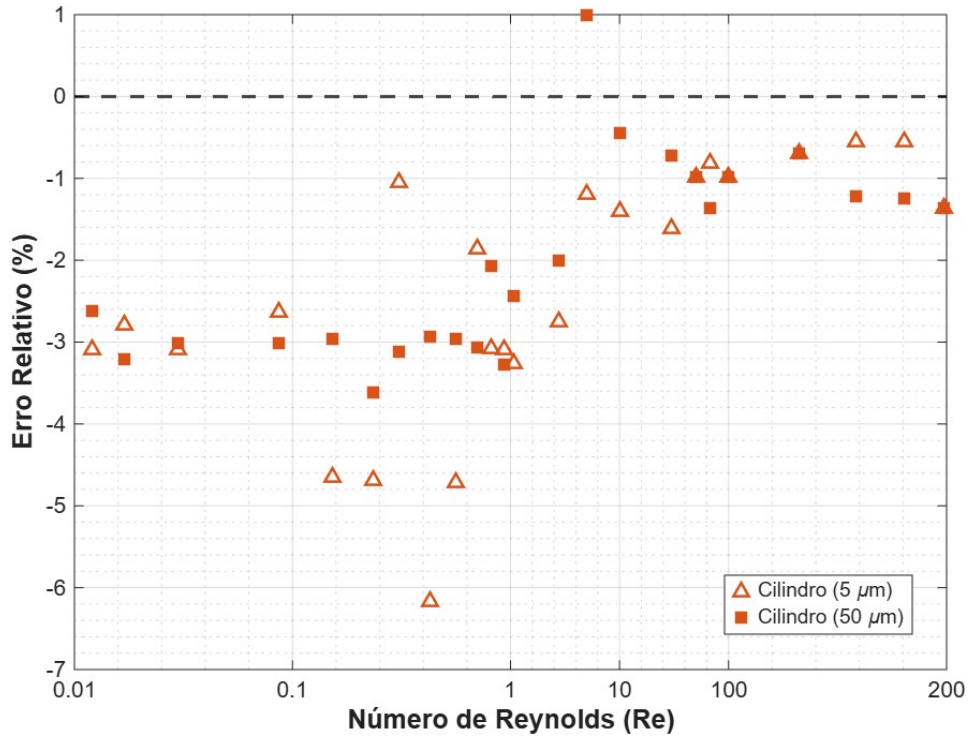


Fonte: Próprio Autor (2026)

A Figura 12 apresenta a dispersão dos erros relativos para partículas cilíndricas. No regime de Stokes, particularmente na faixa $Re < 0,1$, observa-se uma dispersão reduzida dos erros para ambos os tamanhos analisados, indicando boa consistência do modelo nessa subfaixa. No intervalo $0,1 < Re < 1$, as partículas de $5 \mu\text{m}$ passam a apresentar maior dispersão, com a ocorrência de pontos extremos, incluindo valores próximos de -1% e outros inferiores a -6% . Ao avançar para o regime de transição, os erros relativos para ambos os tamanhos tendem a se manter acima de -2% , comportamento semelhante ao observado para as partículas esféricas.

Ainda na Figura 12, destaca-se a presença de um outlier positivo no intervalo $1 < Re < 10$ para a partícula cilíndrica de $50 \mu\text{m}$, com erro da ordem de $+1\%$, indicando uma superestimação pontual do coeficiente de arraste. Esse desvio isolado sugere a ocorrência de efeitos numéricos locais ou limitações da correlação empregada nessa faixa específica de Reynolds.

Figura 12 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Cilíndricas.

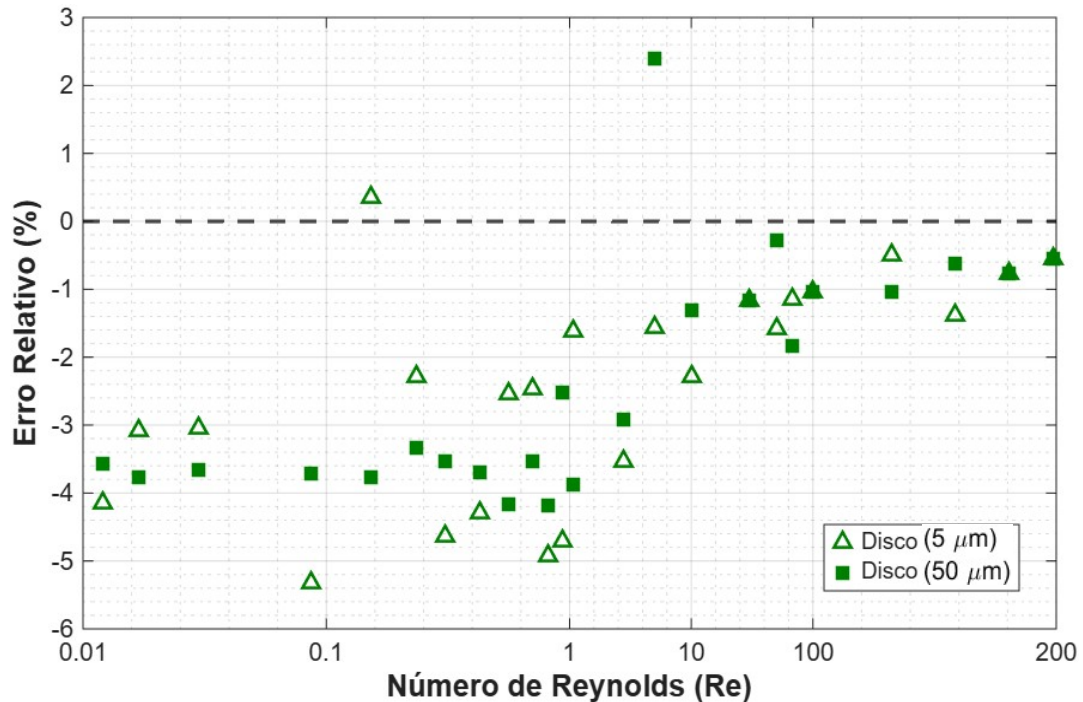


Fonte: Próprio Autor (2026)

A Figura 13 mostra a dispersão dos erros relativos para partículas discoidais. Observa-se que as partículas menores, com diâmetro equivalente de $4,4 \mu\text{m}$, apresentam maior dispersão dos erros, principalmente no regime de Stokes, com destaque para a faixa $0,1 < \text{Re} < 1$. Esse comportamento reforça a tendência observada nas demais geometrias, na qual partículas menores estão associadas a maior variabilidade nos desvios. No intervalo $1 < \text{Re} < 10$, identifica-se também um outlier positivo para a partícula de $44 \mu\text{m}$, com erro superior a 2%, comportamento análogo ao observado para partículas cilíndricas de maior tamanho. No regime de transição, os erros para partículas discoidais tendem a apresentar menor magnitude, concentrando-se em valores acima de -2% .

De forma geral, as diferenças observadas entre os regimes de escoamento podem estar associadas às limitações das correlações analíticas em baixos números de Reynolds, nas quais pequenas variações no campo de velocidades podem resultar em diferenças relativamente amplificadas no coeficiente de arraste. Adicionalmente, a maior dispersão observada para partículas de menor tamanho equivalente sugere que essas partículas são mais sensíveis a flutuações locais do escoamento e a transientes numéricos, demandando maior tempo para a completa estabilização do regime e tornando a previsão do arraste mais suscetível a variações numéricas.

Figura 13 – Dispersão de erros relativos por Reynolds para Partículas Discoidais.



Fonte: Próprio Autor (2026)

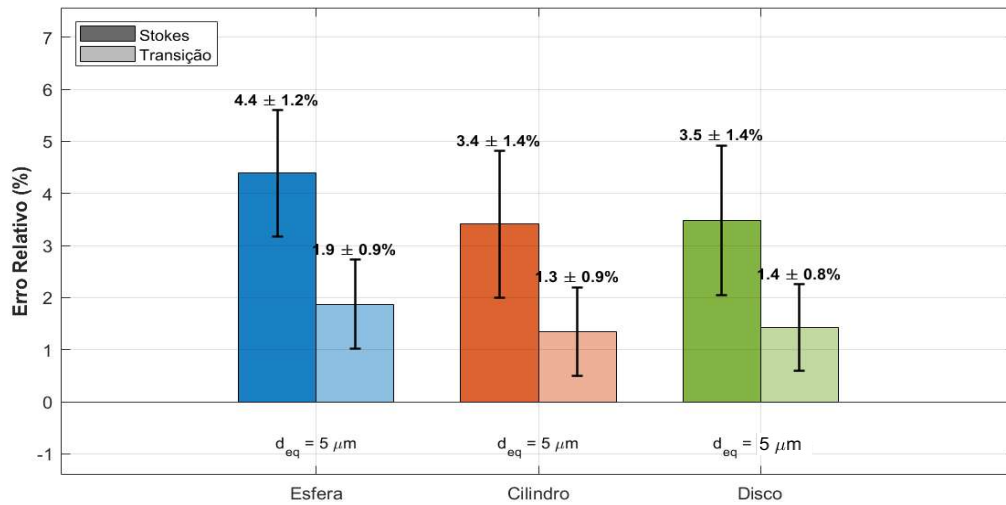
A Figura 14 apresenta o erro relativo médio e o respectivo desvio padrão associados à previsão do coeficiente de arraste para partículas com diâmetro aerodinâmico de $5 \mu\text{m}$, considerando os regimes de Stokes e de transição, para as geometrias esférica, cilíndrica e discoidal. A diferenciação entre os regimes é indicada pela variação de tonalidade das cores, sendo os tons mais escuros associados ao regime de Stokes e os tons mais claros ao regime de transição.

Para as partículas esféricas, observa-se que o erro relativo médio no regime de Stokes é de $4,4 \pm 0,5\%$, reduzindo-se para $1,9 \pm 0,9\%$ no regime de transição. Esse comportamento evidencia uma diminuição significativa do erro médio ao se avançar para números de Reynolds mais elevados.

No caso das partículas cilíndricas, o erro relativo médio no regime de Stokes é de $3,4 \pm 1,4\%$, enquanto no regime de transição o valor reduz-se para $1,3 \pm 0,9\%$. Nota-se, além da redução do erro médio, uma dispersão relativamente maior no regime de Stokes, refletida no desvio padrão mais elevado.

De forma semelhante, as partículas discoidais apresentam erro relativo médio de $3,5 \pm 1,4\%$ no regime de Stokes, diminuindo para $1,3 \pm 0,8\%$ no regime de transição. Assim como observado para os cilindros, a dispersão dos erros é mais pronunciada no regime de Stokes.

Figura 14 – Erro relativo médio e desvio padrão para partículas de tamanho aerodinâmico igual a $5 \mu\text{m}$.



Fonte: Próprio Autor (2026).

A comparação entre as geometrias revela que, embora os valores absolutos de erro variem levemente, não há diferenças substanciais entre esferas, cilindros e discos no regime de transição, onde os erros médios convergem para valores próximos de 1,3–1,9%. Em contrapartida, no regime de Stokes, observa-se maior dispersão para as partículas não esféricas, especialmente cilindros e discos, o que pode estar relacionado à maior complexidade geométrica e à forma como o solver trata a projeção aerodinâmica e o cálculo do arraste para essas geometrias.

A Figura 15 apresenta o erro relativo médio e o respectivo desvio padrão associados à previsão do coeficiente de arraste para partículas com diâmetro aerodinâmico de $50 \mu\text{m}$, considerando os regimes de Stokes e de transição e as geometrias esférica, cilíndrica e discoidal. Assim como na Figura 9, os regimes são diferenciados pela tonalidade das cores, sendo os tons mais escuros representativos do regime de Stokes e os mais claros do regime de transição.

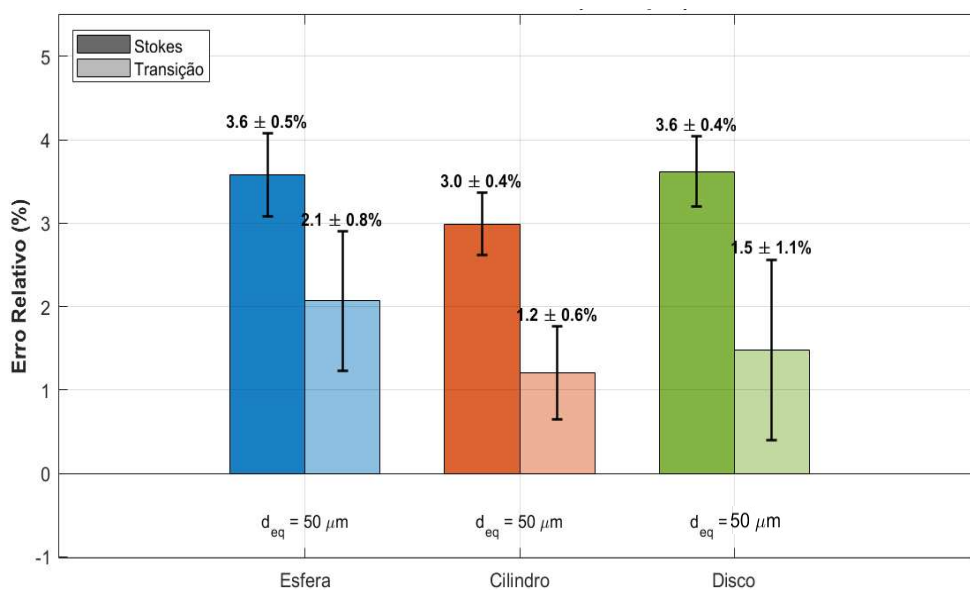
Para as partículas esféricas, o erro relativo médio no regime de Stokes é de $3,6 \pm 0,5\%$, aumentando levemente a dispersão ao se passar para o regime de transição, onde o erro médio é de $2,1 \pm 0,8\%$. Apesar da redução do erro médio, observa-se um aumento do desvio padrão no regime de transição, indicando maior variabilidade dos resultados nessa faixa de escoamento.

No caso das partículas cilíndricas, os erros relativos médios apresentam uma redução mais pronunciada, passando de $3,0 \pm 0,4\%$ no regime de Stokes para $1,2 \pm 0,6\%$ no regime de transição. Nota-se, além da diminuição do erro médio, uma dispersão relativamente contida

em ambos os regimes quando comparada às demais geometrias.

As partículas discoidais exibem erro relativo médio de $3,6 \pm 0,4\%$ no regime de Stokes, reduzindo-se para $1,5 \pm 1,1\%$ no regime de transição. Embora o erro médio diminua de forma consistente, o aumento do desvio padrão no regime de transição sugere maior sensibilidade do solver para essa geometria específica em números de Reynolds mais elevados.

Figura 15 – Erro relativo médio e desvio padrão para partículas de diâmetro equivalente igual a $50 \mu\text{m}$.



Fonte: Próprio Autor (2026).

Os resultados das Figuras 14 e 15 confirmam a tendência observada anteriormente: o regime de Stokes concentra os maiores erros relativos médios, independentemente da geometria considerada. Entretanto, para partículas de maior tamanho aerodinâmico ($50 \mu\text{m}$), os erros no regime de Stokes são ligeiramente menores do que aqueles observados para partículas de $5 \mu\text{m}$, o que sugere uma redução da sensibilidade numérica associada ao aumento do tamanho da partícula.

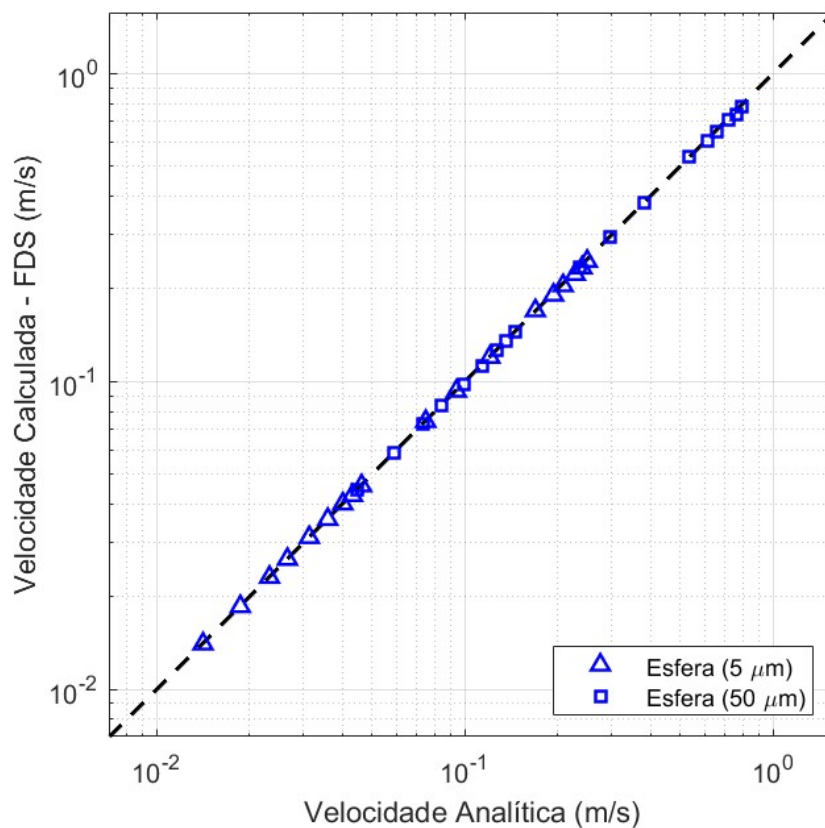
De forma geral, os resultados apresentados indicam que o modelo numérico apresenta desempenho satisfatório em toda a faixa analisada. Os erros médios mantiveram-se inferiores a 5%, esta magnitude de erro é frequentemente compatível com as incertezas experimentais inerentes ao processo de validação, conforme diretrizes de V&V (ASME, 2009). Entretanto, a maior dispersão e os erros mais elevados observados no regime de Stokes, sobretudo para partículas menores, refletem a sensibilidade numérica associada à integração de equações rígidas típicas de partículas com baixo tempo de relaxação, conforme descrito por Crowe et al.

(2011). Esse comportamento evidencia a necessidade de cautela na interpretação dos resultados nessa faixa, bem como a importância de análises complementares de sensibilidade numérica e validação específica para escoamentos de muito baixo Reynolds.

5.2 VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL

A verificação da velocidade terminal é apresentada nas Figuras 16, 17 e 18, que confrontam os valores obtidos numericamente pelo solver do FDS com a solução analítica de referência por meio de gráficos de paridade. Em todos os casos, a reta diagonal ($x = y$) representa a concordância perfeita entre os valores numéricos e analíticos, permitindo avaliar diretamente o desempenho do modelo na reprodução do equilíbrio de forças entre arraste, peso e empuxo.

Figura 16 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Esféricas.



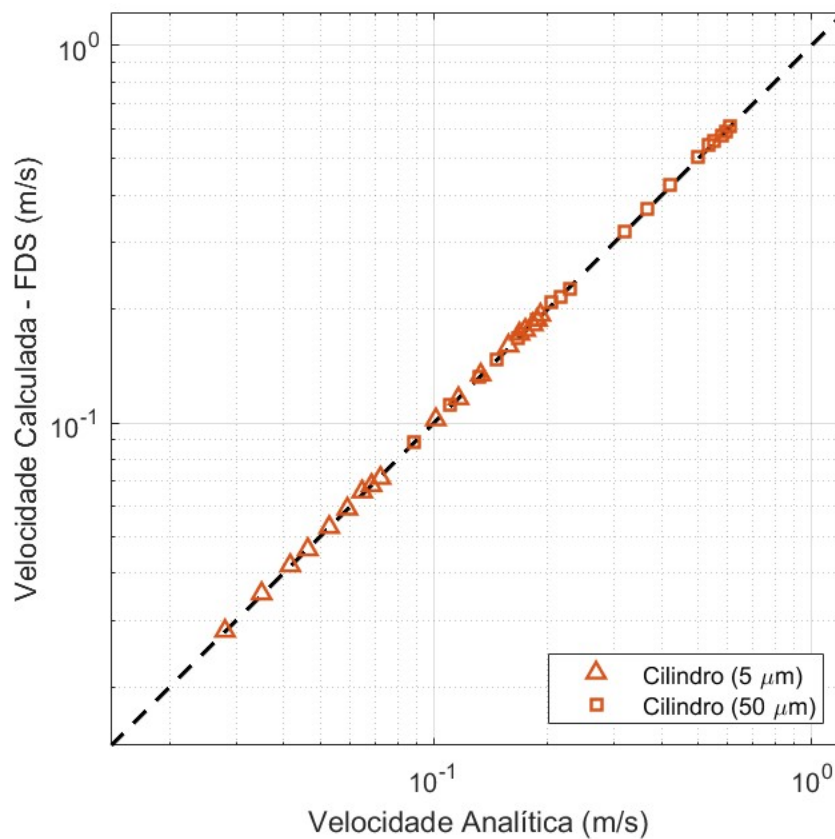
Fonte: Próprio Autor (2026).

A Figura 16, correspondente às partículas esféricas, evidencia uma convergência satisfatória entre os resultados numéricos e analíticos. Observa-se que os pontos se distribuem

majoritariamente ao longo da reta diagonal, indicando que o modelo numérico é capaz de reproduzir com boa precisão a velocidade terminal prevista analiticamente para essa geometria. Esse comportamento confirma a consistência do solver para partículas esféricas, cuja formulação de arraste é bem estabelecida e amplamente validada na literatura.

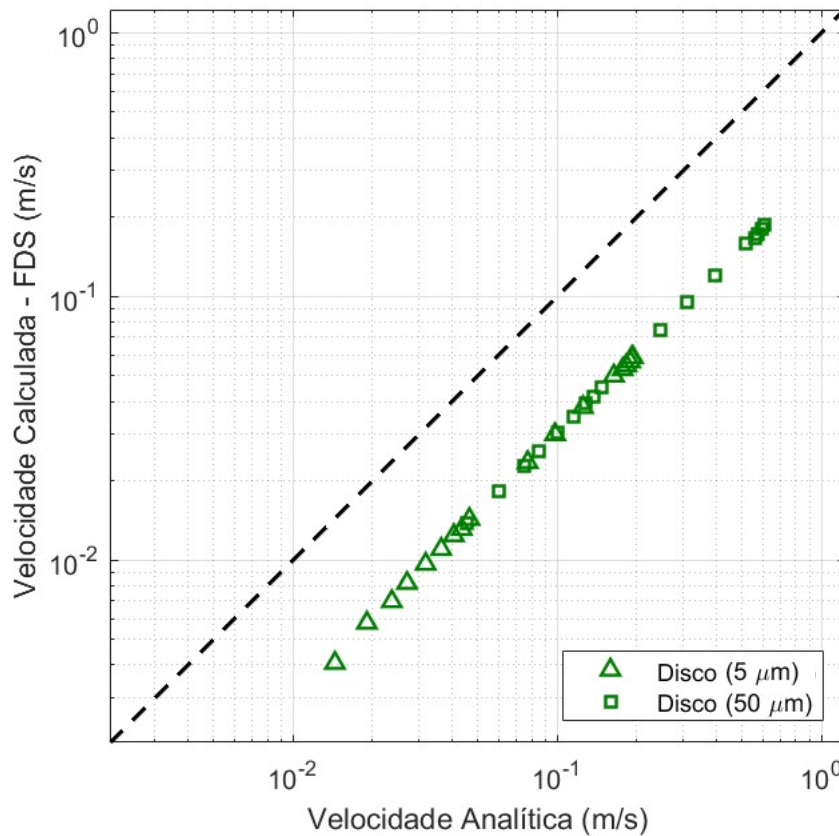
De forma semelhante, a Figura 17, referente às partículas cilíndricas, também apresenta uma boa concordância entre os valores calculados pelo FDS e a solução analítica. Os pontos permanecem próximos da reta de paridade, sugerindo que o solver reproduz adequadamente o balanço de forças para essa geometria. Embora pequenas dispersões possam ser observadas, o comportamento global indica uma representação consistente da velocidade terminal, comparável àquela obtida para as partículas esféricas.

Figura 17 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Cilíndricas.



Fonte: Próprio Autor (2026).

Figura 18 – Verificação da Velocidade Terminal para Partículas Discoidais.

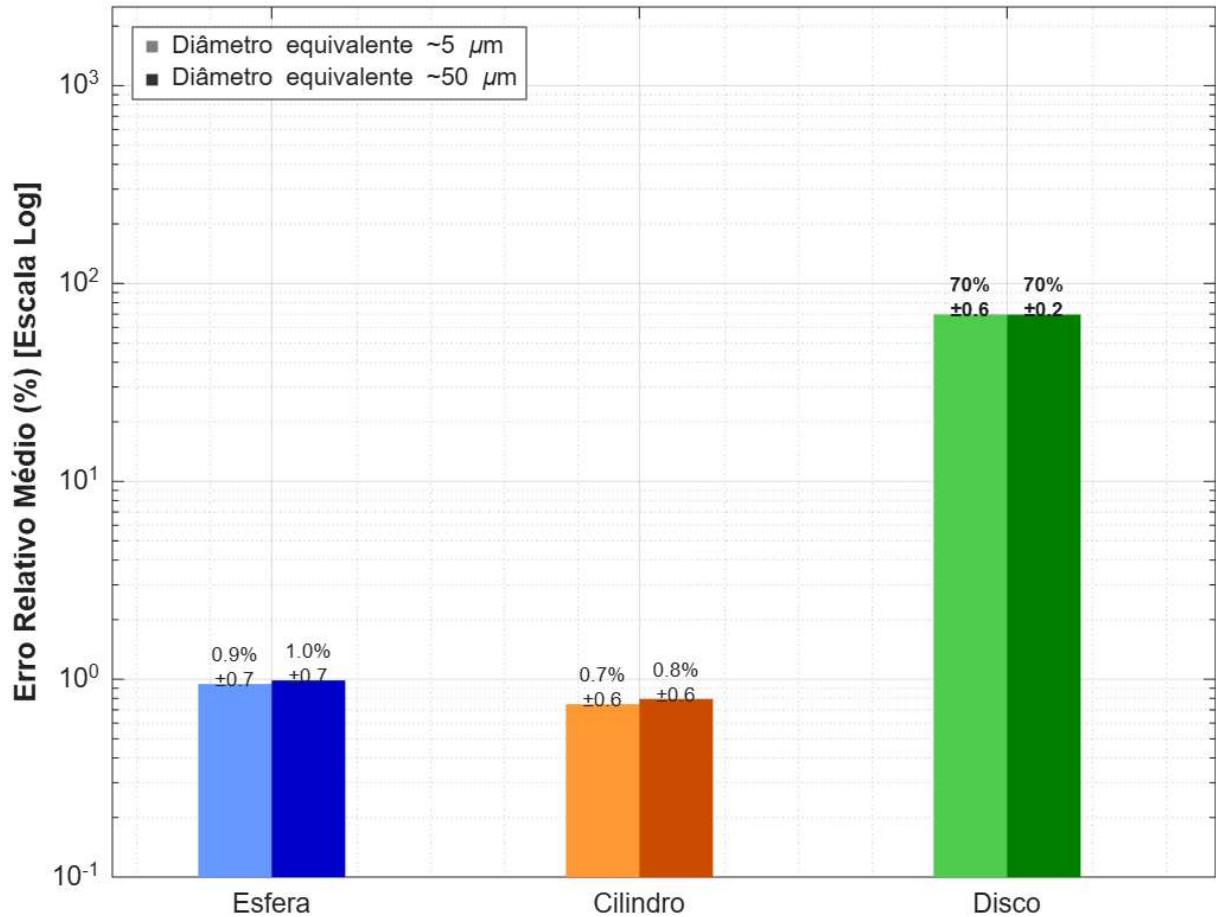


Fonte: Próprio Autor (2026).

Em contrapartida, os resultados para partículas discoidais (Figura 18) apresentam uma anomalia severa. Embora os pontos mantenham um comportamento linear – sugerindo uma correlação proporcional –, eles se dispõem de maneira paralela e significativamente abaixo da diagonal principal. Isso evidencia que o solver do FDS está subestimando sistematicamente a velocidade terminal para partículas discoidais em comparação à formulação analítica adotada.

A magnitude dessa discrepância é quantificada na Figura 19, que apresenta o erro médio relativo absoluto e os desvios-padrão amostrais. Enquanto esferas e cilindros mantêm erros médios residuais próximos a 1%, demonstrando alta correspondência com o modelo teórico, as partículas do tipo disco atingem erros médios alarmantes, na ordem de 70%.

Figura 19 – Erro relativo e desvio-padrão para a determinação da velocidade terminal da partícula.



Fonte: Próprio Autor (2026)

Uma análise crítica dos erros relativos e dos desvios-padrão apresentados na Figura 19 fornece subsídios importantes para a compreensão da natureza das discrepâncias observadas. Verifica-se que, para as partículas discoidais, os desvios-padrão são extremamente reduzidos, variando entre aproximadamente 0,4% para o diâmetro de 50 µm e 0,6% para o diâmetro de 5 µm. A coexistência de um erro sistemático elevado, da ordem de 70%, com elevada repetibilidade dos resultados – evidenciada pelo baixo desvio-padrão e pela forte linearidade observada na Figura 18 – indica que a discrepância não está associada a instabilidades numéricas, flutuações aleatórias ou dependência da malha.

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), erros numéricos clássicos decorrentes de discretização espacial ou temporal tendem a manifestar-se por meio de padrões difusos, instabilidade dos resultados ou sensibilidade significativa à resolução da malha. No presente estudo, a ausência desses comportamentos, aliada à elevada coerência interna dos dados obtidos para as partículas discoidais, afasta a hipótese de erro numérico, apontando para

a presença de um erro sistemático, associado às hipóteses ou à formulação adotada no modelo.

Considerando que a etapa anterior de verificação do coeficiente de arraste demonstrou boa concordância entre os valores numéricos e as soluções analíticas, pode-se inferir que as forças aerodinâmicas estão sendo corretamente calculadas pelo solver. Assim, a discrepância observada especificamente na predição da velocidade terminal sugere uma inconsistência associada à forma como determinados parâmetros geométricos são empregados no balanço final de forças. Uma hipótese plausível é a existência de diferenças na definição ou no uso do comprimento característico adotado internamente para o cálculo da velocidade terminal, em comparação àquele utilizado na formulação do coeficiente de arraste ou àquele assumido na solução analítica de referência, como o diâmetro hidráulico ou o diâmetro equivalente por área projetada.

Dessa forma, os resultados indicam que, para partículas discoidais, a predição da velocidade terminal pelo FDS apresenta limitações quando empregadas as hipóteses geométricas adotadas neste estudo, exigindo cautela na interpretação dos valores obtidos e, possivelmente, a adoção de ajustes adicionais ou reparametrizações dos dados de entrada. Em contrapartida, para as geometrias esférica e cilíndrica, a estabilidade numérica observada e os baixos erros relativos obtidos reforçam a adequação do modelo e validam o uso da ferramenta nessas condições.

6 CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como objetivo avaliar a aplicabilidade do *Fire Dynamics Simulator* (FDS) como ferramenta de fluidodinâmica computacional para estudos de dispersão de partículas sólidas no ar, com foco na verificação do coeficiente de arraste e da velocidade terminal para partículas de diferentes geometrias e tamanhos equivalentes. A partir dos resultados obtidos, foi possível estabelecer conclusões consistentes quanto às capacidades e limitações do modelo numérico avaliado.

No que se refere à avaliação das geometrias esférica, cilíndrica e discoidal a partir de critérios de equivalência dimensional, os resultados demonstraram que a abordagem adotada permite comparações coerentes entre diferentes formatos de partículas no contexto da previsão do coeficiente de arraste. Para todas as geometrias analisadas, observou-se boa concordância global entre os valores calculados pelo FDS e as correlações analíticas de referência, indicando que o software é capaz de representar adequadamente o balanço de forças aerodinâmicas quando critérios consistentes de equivalência são empregados.

A verificação do coeficiente de arraste evidenciou que o desempenho do solver é fortemente influenciado pelo regime de escoamento e pelo tamanho das partículas. De modo geral, os erros relativos mantiveram-se inferiores a 5%, magnitude compatível com incertezas típicas de processos de validação numérica. Observou-se, contudo, que o regime de Stokes concentra maiores dispersões e desvios, sobretudo para partículas menores, o que indica maior sensibilidade numérica em escoamentos dominados por forças viscosas. Em contrapartida, no regime de transição, os erros médios convergiram para valores mais baixos e semelhantes entre as geometrias, sugerindo maior robustez do modelo nessa faixa de Reynolds.

Quanto à determinação da velocidade terminal, os resultados revelaram comportamentos distintos ditados pela morfologia. Para partículas esféricas e cilíndricas, a concordância com a solução analítica clássica foi excelente (erro $\sim 1\%$), validando a consistência do modelo quando há proporcionalidade entre o aumento da área de arrasto e o volume da partícula.

Entretanto, para partículas discoidais, a comparação direta com a solução analítica de esferas (baseada no diâmetro equivalente por área projetada) resultou em uma discrepância de 70%. Embora a literatura de dinâmica de partículas (e.g., Haider & Levenspiel) já preveja a necessidade de fatores de forma para correções de partículas muito irregulares, o presente estudo quantificou a magnitude desse desvio especificamente no ambiente de simulação do FDS ao se aplicar estritamente os critérios dimensionais de normas ambientais (como o

diâmetro aerodinâmico).

O erro elevado, neste contexto, não denota falha na simulação, mas sim a limitação severa da metodologia de equivalência geométrica simples. O modelo numérico capturou corretamente a física do disco (alta resistência aerodinâmica para baixa massa), enquanto a equação analítica de referência superestimou a velocidade por assumir a esfericidade ().

Conclui-se, portanto, que o FDS é uma ferramenta robusta, mas sua aplicação para partículas não-esféricas exige cautela: a inserção da geometria real no software (como feito neste trabalho) produz resultados fisicamente mais realistas do que as estimativas analíticas baseadas apenas no diâmetro equivalente. Para trabalhos futuros ou validações analíticas de partículas lamelares, recomenda-se a utilização obrigatória de correlações que considerem a esfericidade ou a correção da densidade efetiva, visto que a simples equivalência por diâmetro projetado, embora útil para o cálculo do arrasto, mostra-se insuficiente para a predição da velocidade terminal.

REFERÊNCIAS

AGSOLVE. O que é o material particulado e como ele chega ao ar. AG Solve, 2024. Disponível em: <https://www.agsolve.com.br/noticias/10509/o-que-e-o-material-particulado-e-como-ele-chega-ao-ar>. Acesso em: 11 jan. 2026.

ALLEN, Terence. Particle size measurement. 4. ed. London: Chapman and Hall, 1990. 806 p. (Powder Technology Series).

AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS – ASME. ASME V&V 20-2009: Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer. New York: ASME, 2009.

ATUYAMBE, Lynn M. et al. Knowledge, risk perception and practices regarding air pollution and associated non-communicable diseases among boda-boda cyclists in Kampala, Uganda. BMC Public Health, v. 24, n. 1, art. 1225, 2024.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução nº 491, de 19 de novembro de 2018. Dispõe sobre padrões de qualidade do ar. Diário Oficial da União: seção 1, Brasília, DF, n. 223, p. 155-156, 21 nov. 2018. Disponível em: https://www.in.gov.br/materia/-/asset_publisher/Kujrw0TZC2Mb/content/id/51058895. Acesso em: 11 jan. 2026.

CROWE, Clayton T.; SOMMERFELD, Martin; TSUJI, Yutaka. Multiphase flows with droplets and particles. Boca Raton: CRC Press, 1998. 471 p.

CROWE, Clayton T. et al. Multiphase flows with droplets and particles. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1201/b11103>. Acesso em: 11 jan. 2026.

DECKER, Rodrigo Koerich. Modelagem e simulação tridimensional transiente do escoamento gás-sólido. 2003. 137 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2003.

DUDUKOVIC, Milorad P.; LARACHI, Faiçal; MILLS, Patrick L. Multiphase catalytic reactors: a perspective on current knowledge and future trends. Catalysis Reviews, v. 44, n. 1, p. 123-246, 2002.

ELGHOBASHI, Said. On predicting particle-laden turbulent flows. Applied Scientific Research, v. 52, n. 4, p. 309-329, 1994.

EUROPEAN ENVIRONMENT AGENCY. EMEP/EEA air pollutant emission inventory guidebook 2023: technical guidance to prepare national emission inventories. Copenhagen: EEA, 2023. (EEA Report, n. 06/2023). Disponível em: <<https://www.eea.europa.eu/publications/emep-eea-guidebook-2023>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

FLOYD, Jason; OVERHOLT, Kristopher; EZEKOYE, Ofodike. Soot deposition and gravitational settling modeling and the impact of particle size and agglomeration. *Fire Safety Science*, v. 11, p. 376-388, 2014.

G1 MARANHÃO. Poluição do ar ultrapassou os limites seguros em mais de 900 vezes em 2023 em São Luís, aponta pesquisa. G1, Maranhão, 22 mar. 2025.

GHOSE, Mrinal K.; MAJEE, S. R. Characteristics of hazardous airborne dust around an Indian surface coal mining area. *Environmental Monitoring and Assessment*, v. 130, p. 17-25, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10661-006-9448-6>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

GIDASPOW, Dimitri. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Boston: Academic Press, 1994. 467 p.

GOUESBET, Gérard; BERLEMONT, Alain. Eulerian and Lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 25, n. 2, p. 133-159, 1999.

HARRISON, Roy M. *et al.* Non-exhaust vehicle emissions of particulate matter and VOC from road traffic: A review. *Atmospheric Environment*, v. 262, art. 118592, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2021.118592>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

HINDS, William C. *Aerosol technology: properties, behavior, and measurement of airborne particles*. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. 483 p.

HOERNER, Sighard F. *Fluid-dynamic drag: practical information on aerodynamic drag and hydrodynamic resistance*. 2. ed. Brick Town, NJ: Hoerner Fluid Dynamics, 1965. 455 p.

HU, Long Hua *et al.* Modeling fire-induced smoke spread and carbon monoxide transportation in a long channel: Fire Dynamics Simulator comparisons with measured data. *Journal of Hazardous Materials*, v. 140, n. 1-2, p. 293-298, 2007.

ISHII, Mamoru; HIBIKI, Takashi. Thermo-fluid dynamics of two-phase flow. 2. ed. New York: Springer, 2011. 462 p. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7985-8>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

JOSHI, D. C. *et al.* Fine particulate matter (PM_{2.5}, PM₁₀): A silent catalyst for chronic lung diseases in India; a comprehensive review. *Environmental Challenges*, v. 20, p. 101215, 2025.

KARAGULIAN, Federico *et al.* Contributions to cities' ambient particulate matter (PM): A systematic review of local source contributions at global level. *Atmospheric Environment*, v. 120, p. 475-483, 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231015303320>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

LAGZI, István *et al.* *Atmospheric Chemistry*. Budapest: Eötvös Loránd University, 2013.

LANDRIGAN, Philip J. *et al.* The Lancet Commission on pollution and health. *The Lancet*, v. 391, n. 10119, p. 462-512, 2018.

LOTH, Eric. *Fluid Dynamics of Particles, Drops, and Bubbles*. Cambridge: Cambridge University Press, 2023.

LU, Kaihua *et al.* Investigation of the wind-direction effect on buoyancy-driven fire smoke dispersion in an urban street canyon. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, v. 20, n. 3, art. 2568, 2023.

LUNA, Carlos Manuel Romero. *Análise e demonstração do comportamento do escoamento bifásico gás-sólido*. 2009. 97 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2009.

MARCHIOLI, Cristian *et al.* Particle-laden flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 191, art. 105291, 2025.

MAXEY, Martin R.; RILEY, James J. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids*, v. 26, n. 4, p. 883-889, 1983.

MCCABE, Warren L.; SMITH, Julian C.; HARRIOTT, Peter. *Unit operations of chemical engineering*. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 1993.

MCGRATTAN, Kevin et al. Fire Dynamics Simulator technical reference guide: volume 1: mathematical model. 6. ed. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2024. (NIST Special Publication, 1018).

MICHAELIDES, Efstathios E.; CROWE, Clayton T.; SCHWARZKOPF, John D. (Ed.). Multiphase flow handbook. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2017.

MOUILLEAU, Yannick; CHAMPASSITH, A. CFD simulations of atmospheric gas dispersion in complex environments. Chemical Engineering Transactions, v. 17, p. 1065-1070, 2009.

NORDAM, Tor et al. A comparison of Eulerian and Lagrangian methods for vertical particle transport in the water column. Geoscientific Model Development, v. 16, n. 18, p. 5339-5363, 2023.

POPE III, C. Arden; DOCKERY, Douglas W. Health Effects of Fine Particulate Air Pollution: Lines that Connect. Journal of the Air & Waste Management Association, v. 56, n. 6, p. 709-742, 2006.

RANADE, Vivek V. Computational flow modeling for chemical reactor engineering. San Diego: Academic Press, 2002. 452 p. (Process Systems Engineering Series, v. 5).

RHODES, Martin J.; SEVILLE, Jonathan. Introduction to particle technology. 3. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2024. 496 p.

RIBEIRO, Elizêne Veloso. A indústria metalúrgica na região de Pirapora - MG/Brasil: a distribuição da poluição por material particulado, sua composição e impactos associados. 2016. 161 f. Tese (Doutorado em Geografia) – Instituto de Geociências, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2016.

RINNE, Tuomo; HIETANIEMI, Jukka; HOSTIKKA, Simo. Experimental validation of the FDS simulations of smoke and toxic gas concentrations. Espoo: VTT Technical Research Centre of Finland, 2006. (VTT Working Papers, 66).

SANTIAGO, Aline; PRADO, Rogério Junqueira; MODESTO FILHO, Paulo; ALONSO, Rafael Viana. Caracterização do material particulado suspenso no ar de Cuiabá-MT no período de queimadas. Revista Matéria, Rio de Janeiro, v. 20, n. 1, p. 273–283, 2015.

SHY, Carl M. Epidemiologic Evidence and the United States Air Quality standards. American Journal of Epidemiology, v. 110, n. 6, p. 661-671, 1979.

SILVA, Ricardo Galdino da. Estudo numérico de movimentação de partículas em escoamentos. 2006. 256 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006.

SMARDZ, Piotr. Validation of FDS for forced ventilation fires. *Journal of Fire Protection Engineering*, v. 16, n. 2, p. 127-140, 2006.

SUBRAMANIAM, Shankar. Lagrangian–Eulerian methods for multiphase flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 39, n. 2-3, p. 215-245, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.10.003>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

TECAM GROUP. Polvo y partículas en suspensión: los retos del tratamiento de partículas. Tecam Group, 6 out. 2021. Disponível em: <<https://tecamgroup.com/es/polvo-y-particulas-en-suspension-los-retos-del-tratamiento-de-particulas/>>. Acesso em: 11 jan. 2026

VAN WACHEM, Berend G. M.; ALMSTEDT, Anders E. Methods for multiphase computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, v. 96, n. 1-3, p. 81-98, 2003.

VEGENDLA, Siva N. P.; HEYNDERICKX, Geraldine J.; MARIN, Guy B. Comparison of Eulerian–Lagrangian and Eulerian–Eulerian method for dilute gas–solid flow with side inlet. *Computers & Chemical Engineering*, v. 35, n. 7, p. 1192-1199, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.09.001>>. Acesso em: 11 jan. 2026.

VERSTEEG, Henk Kaarle; MALALASEKERA, Weeratunge. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. 2. ed. Harlow: Pearson Education, 2007.

WARE, James H. et al. Assessment of the Health Effects of Atmospheric Sulfur Oxides and Particulate Matter: Evidence from Observational Studies. *Environmental Health Perspectives*, v. 41, p. 255-276, 1981.

WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Ambient air pollution: a global assessment of exposure and burden of disease*. Geneva: WHO, 2016.

WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Burden of disease from ambient air pollution for 2016*. Version 2. Geneva: WHO, abr. 2018. Disponível em: <https://cdn.who.int/media/docs/default-source/air-pollution-documents/air-quality-and-health/aap_bod_results_may2018_final.pdf>. Acesso em: 11 jan. 2026.

WORLD HEALTH ORGANIZATION. Burden of disease from household air pollution for 2016. Version 3. Geneva: WHO, abr. 2018. Disponível em: <https://cdn.who.int/media/docs/default-source/air-pollution-documents/air-quality-and-health/hap_bod_results_may2018_final.pdf>. Acesso em: 11 jan. 2026.

WORLD HEALTH ORGANIZATION. Burden of disease from the joint effects of household and ambient air pollution for 2016. Version 2. Geneva: WHO, maio 2018. Disponível em: <https://cdn.who.int/media/docs/default-source/air-pollution-documents/air-quality-and-health/hap_bod_results_may2018_final.pdf>. Acesso em: 11 jan. 2026.

YAN, Hongjie *et al.* Euler-Euler modeling of reactive bubbly flow in a bubble column. *Physics of Fluids*, v. 34, n. 5, art. 053306, 2022.

YANG, H. W.; GUO, S. L.; LI, Y. X.; YANG, Y. W.; WANG, C.; MENG, X. W. *et al.* Synthesis and formation mechanism of micron-size silver flakes with high radius–thickness ratio: application to silver paste. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, v. 28, p. 16267–16273, 2017.

YUAN, Liming; ZHOU, Lihong; SMITH, Alex C. Modeling carbon monoxide spread in underground mine fires. *Applied Thermal Engineering*, v. 100, p. 1319-1326, 2016.

ZHANG, Wei *et al.* Comparison of FDS predictions with experimental data from a full-scale fire test. *Fire Safety Journal*, v. 43, n. 4, p. 301-309, 2008.

ZHANG, Yong *et al.* Simulation of particle mixing and separation in multi-component fluidized bed using Eulerian-Eulerian method: a review. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v. 17, n. 11, art. 20190064, 2019.

ZHANG, Zhao; CHEN, Qingyan. Comparison of the Eulerian and Lagrangian methods for predicting particle transport in enclosed spaces. *Atmospheric Environment*, v. 41, n. 25, p. 5236-5248, 2007.

ZHAO, Junnan GUO, Xinyao, LIU, Guodong *et al.* A review of the continuum theory-based stress and drag models in gas-solid flows. *Energies*, v. 16, n. 1, art. 65, 2023.

APÊNDICE A – ALGORITMO USADO PARA VERIFICAÇÃO DO CÁLCULO DO COEFICIENTE DE ARRASTE

```

&HEAD CHID='arraste' /

&MESH IJK=40,20,20,XB=0,2,0,1,0,1/

&TIME T_END=10 /
&RADI RADIATION=.FALSE./

&VENT MB='XMIN',SURF_ID='VELIN'/
&VENT MB='XMAX',SURF_ID='OPEN'/
&VENT MB='YMIN',SURF_ID='SLIP'/
&VENT MB='YMAX',SURF_ID='SLIP'/
&VENT MB='ZMIN',SURF_ID='SLIP'/
&VENT MB='ZMAX',SURF_ID='SLIP'/

&SURF ID='VELIN', COLOR = BLUE, VEL= -46.9/
&SURF ID='SLIP',FREE_SLIP=.TRUE. /

&SLCF PBY=0.5,QUANTITY='VELOCITY',VECTOR=.TRUE./
&SLCF PBY=0.5,QUANTITY='PRESSURE'/

&MATL ID='PARTICLE',DENSITY=1000., CONDUCTIVITY=1, SPECIFIC_HEAT=1. /
&SURF ID='PARTICLE', GEOMETRY='CYLINDRICAL',MATL_ID='PARTICLE', RADIUS = 0.000025 ,
LENGTH = 800e-6 /
&PART ID='DRAG 5', SURF_ID='PARTICLE', DRAG_LAW='CYLINDER', STATIC=.TRUE.,
QUANTITIES(1:3)='PARTICLE DRAG COEFFICIENT', 'PARTICLE DRAG FORCE X', 'PARTICLE
DIAMETER' /

&INIT XB = 0.9,0.9,0.5,0.6,0.5,0.6, N_PARTICLES_PER_CELL=1, CELL_CENTERED=.TRUE.,
PART_ID='DRAG 5'/

&DUMP DT_DEVC=0.1 /

&DEVC XB= 0,2,0,1,0,1, QUANTITY='PRESSURE', ID='FDS 5' /

&DEVC XB = 0.7,1.1,0.,1.,0.,1., QUANTITY='PARTICLE DRAG
COEFFICIENT',ID='Cd',PART_ID='DRAG 5',SPATIAL_STATISTIC='MEAN' /

&DEVC XB = 0.7,1.1,0.,1.,0.,1., QUANTITY='U-VELOCITY',ID='U-VEL' /

&TAIL /

```

APÊNDICE B – ALGORITMO USADO PARA VERIFICAÇÃO DA VELOCIDADE TERMINAL DA PARTÍCULA

```

&HEAD CHID='velocidade_terminal'/

&MESH IJK=4,4,10, XB=-1.0,1.0,-1.0,1.0,1,-400 /

&TIME DT=0.01, T_END= 500., LOCK_TIME_STEP=.TRUE. /

&RADI RADIATION=.FALSE./

&DUMP SIG_FIGS=16, NFRAMES=20. /

&MISC NOISE=.FALSE., GVEC(3)=-6.7, FREEZE_VELOCITY=.TRUE. /

&WIND STRATIFICATION=.FALSE. /

&MATL ID='STUFF', DENSITY=1000., CONDUCTIVITY=0.1, SPECIFIC_HEAT=1. /
&SURF ID='disk', LENGTH = 4.4E-6, WIDTH = 4.4E-6, THICKNESS = 0.1E-6, MATL_ID='STUFF',
GEOMETRY='CARTESIAN' /

&PART ID='particles', SURF_ID='disk', DRAG_COEFFICIENT= 48., QUANTITIES(1:2)='PARTICLE W',
'PARTICLE DIAMETER' /

&INIT ID='ball', XB=0.,0.,0.,0.,0.,0., UVW=0.,0.,0., N_PARTICLES=1, PART_ID='particles' /

&DEVC ID='w', INIT_ID='ball', QUANTITY='PARTICLE W', TIME_AVERAGED=F /
&DEVC ID='z', INIT_ID='ball', QUANTITY='PARTICLE Z', TIME_AVERAGED=F /

&VENT MB='ZMIN', SURF_ID='OPEN' /
&VENT MB='ZMAX', SURF_ID='OPEN' /

&TAIL /

```