

Simulação de Propagação de Poluentes em Corpos d'Água Usando Autômatos Celulares: Modelagem de Advecção, Difusão e Decaimento

Marley Pinheiro Martins¹, Jones Oliveira de Albuquerque¹

¹Departamento de Estatística e Informática
Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE) – Recife – PE – Brasil

{marley.martins, jones.albuquerque}@ufrpe.br

Resumo. Este trabalho apresenta um modelo baseado em autômatos celulares (AC) para simular a propagação de poluentes em corpos d'água, incorporando processos fundamentais de advecção, difusão e decaimento químico/biológico. O modelo representa a superfície aquática por uma grade bidimensional de células discretas, cada qual com uma variável de concentração de poluente. Regras locais simples, inspiradas nas equações de conservação (equação de advecção-difusão) e adaptadas ao paradigma dos AC, permitem reproduzir padrões de plume, formação de franjas e a dispersão influenciada por um campo de velocidade (correnteza). Implementamos a simulação em Python com visualização em tempo real via Pygame e geração de análises com Matplotlib. Os resultados mostram como variações em velocidade, difusividade e taxa de decaimento alteram a área afetada e o perfil temporal da concentração média, demonstrando que autômatos celulares constituem uma ferramenta acessível e poderosa para estudos educacionais e de planejamento ambiental.

Abstract. This paper presents a model based on Cellular Automata (CA) to simulate pollutant propagation in water bodies, integrating fundamental processes of advection, diffusion, and chemical/biological decay. The model represents the water surface as a two-dimensional grid of discrete cells, each holding a variable for pollutant concentration. Simple local rules, inspired by conservation equations (advection-diffusion equation) and adapted to the CA paradigm, enable the reproduction of plume patterns, fringe formation, and dispersion influenced by velocity fields (currents). The simulation was implemented in Python, utilizing Pygame for real-time visualization and Matplotlib for analytical outputs. Results indicate how variations in velocity, diffusivity, and decay rates alter the affected area and the temporal profile of mean concentration, demonstrating that Cellular Automata serve as an accessible and powerful tool for educational purposes and environmental planning.

1. Introdução

A preservação da qualidade dos recursos hídricos e a mitigação de desastres ambientais exigem ferramentas preditivas capazes de simular a dinâmica de contaminantes com precisão e rapidez. A compreensão dos processos de transporte de poluentes — governados fundamentalmente por mecanismos de advecção e difusão — é essencial para o gerenciamento de crises, como vazamentos industriais ou dispersão de esgoto em corpos d'água. Tradicionalmente, a modelagem desses fenômenos baseia-se em modelos contínuos descritos por Equações Diferenciais Parciais (EDPs), notadamente a equação de

advecção-difusão. Embora rigorosas, as soluções numéricas para essas equações, como Diferenças Finitas ou Volumes Finitos, frequentemente demandam alto custo computacional e complexidade na implementação de condições de contorno variáveis.

Nesse contexto, os Autômatos Celulares (AC) emergem como uma abordagem alternativa eficiente e intuitiva para a modelagem de sistemas complexos. Introduzidos originalmente por Von Neumann e Ulam, e popularizados por Wolfram, os ACs operam sob um paradigma discreto onde o espaço é representado por uma grade de células e o tempo avança em passos discretos. A premissa central é que comportamentos macroscópicos sofisticados — como o fluxo de fluidos ou a dispersão de partículas — podem emergir da interação de regras locais simples aplicadas uniformemente a cada célula e sua vizinhança.

2. Fundamentação Teórica

2.1 Autômatos Celulares (AC)

Autômatos Celulares são sistemas dinâmicos discretos no tempo e no espaço, ideais para a modelagem de sistemas complexos onde o comportamento global emerge de interações locais. Formalmente, um AC pode ser definido como uma quintupla $\mathcal{A} = \langle \mathcal{L}, S, \mathcal{N}, f, t \rangle$, onde:

- \mathcal{L} representa o **reticulado** (ou grade) regular de células;
- S é o conjunto finito ou contínuo de **estados** possíveis para cada célula;
- \mathcal{N} define a **vizinhança** de influência de cada célula (tipicamente vizinhança de von Neumann ou Moore);
- $f : S^{|\mathcal{N}|} \rightarrow S$ é a **função de transição local** que determina o novo estado de uma célula com base no seu estado atual e nos estados de seus vizinhos;
- t representa o passo de tempo discreto ($t = 0, 1, 2, \dots$).

Embora a definição clássica de AC, proposta por Von Neumann, utilize um conjunto finito de estados (como 0 ou 1), a modelagem de fenômenos físicos de transporte frequentemente exige o uso de **Autômatos Celulares de Estados Contínuos** (Continuous-State Cellular Automata - CSCA). Neste paradigma, o estado S de uma célula (i, j) no tempo t , denotado por $C_{i,j}^t$, assume um valor real ($S \in \mathbb{R}$), representando grandezas como temperatura ou, neste trabalho, a concentração de um poluente.

2.2 A Equação de Advecção-Difusão

A dinâmica de transporte de contaminantes em fluidos é classicamente descrita pela equação de advecção-difusão. Esta Equação Diferencial Parcial (EDP) governa a evolução da concentração $C(\mathbf{x}, t)$ de um soluto em função do tempo t e do espaço \mathbf{x} , expressa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = D\nabla^2 C - \lambda C + S(\mathbf{x}, t)$$

Cada termo desta equação corresponde a um fenômeno físico que deve ser "traduzido" para as regras do autômato:

$$\frac{\partial C}{\partial t}$$

1. **Termo Temporal** ($\frac{\partial C}{\partial t}$): A taxa de variação da concentração no tempo. No AC, isso corresponde à diferença entre o estado no passo $t+1$ e no passo t .
2. **Advecção** ($\nabla \cdot (\mathbf{u}C)$): Representa o transporte do poluente devido ao movimento do fluido (correnteza), onde \mathbf{u} é o vetor velocidade. Em um modelo discreto, isso implica o deslocamento de massa de uma célula para suas vizinhas na direção do fluxo.
3. **Difusão** ($D\nabla^2 C$): Representa o espalhamento natural do poluente de regiões de alta concentração para baixa concentração (movimento Browniano), modulado pelo coeficiente de difusão D . No contexto de AC, o operador Laplaciano (∇^2) é frequentemente aproximado pela diferença entre a concentração da célula central e a média de seus vizinhos.
4. **Dcaimento/Reação** ($-\lambda C$): Representa a perda de massa por processos químicos, biológicos ou decaimento radioativo, onde λ é a constante de taxa.
5. **Fonte** ($S(\mathbf{x}, t)$): Representa a injeção externa de poluente no sistema.

A estratégia deste trabalho consiste em discretizar estes operadores contínuos através de regras de transição locais, permitindo que o sistema resolva a complexidade da EDP através de operações aritméticas simples iteradas sobre a grade \mathcal{L} .

3. Metodologia

A implementação do modelo computacional foi realizada em linguagem Python, utilizando a biblioteca **NumPy** para manipulação vetorial de alta performance das grades e **Pygame** para a renderização gráfica em tempo real.

3.1 Discretização e Estrutura de Dados

O domínio espacial é discretizado em uma grade retangular de dimensões $N_x \times N_y$. Para as simulações apresentadas, adotou-se $N_x = 180$ e $N_y = 110$. O estado de cada célula (i, j) no instante t é representado por um valor escalar $C_{i,j}^t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, correspondente à concentração do poluente.

As condições de contorno configuradas foram do tipo **aberta** (*open boundary*), onde a massa transportada para fora dos limites da grade é removida permanentemente do sistema, simulando um corpo d'água extenso.

3.2 Algoritmo de Atualização (Operator Splitting)

A evolução temporal do sistema utiliza uma abordagem de *operator splitting*, onde os processos físicos são aplicados sequencialmente em cada passo de tempo Δt . A transição de estado $C^t \rightarrow C^{t+1}$ segue a ordem: Advecção, Difusão e Decaimento.

A. Advecção (Transporte de Massa)

Diferente de abordagens puramente baseadas em gradientes, implementou-se um esquema de transporte de massa explícito, inspirado em métodos de Lattice Boltzmann. Dado um campo de velocidade $\vec{u} = (u_x, u_y)$, calcula-se a fração de massa ϕ que deve deixar a célula em cada direção:

$$\phi_x = \text{clip} \left(\frac{u_x \Delta t}{\Delta x}, -1, 1 \right), \quad \phi_y = \text{clip} \left(\frac{u_y \Delta t}{\Delta y}, -1, 1 \right)$$

A massa que permanece na célula central (C_{rem}) e a massa que se move (C_{move}) são calculadas, e os arrays resultantes são deslocados (*shifted*) espacialmente para as células vizinhas correspondentes. Este método garante conservação de massa local e estabilidade numérica, respeitando a condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

B. Difusão

Após a etapa de advecção, o campo intermediário C^* sofre difusão isotrópica. Utilizou-se a discretização do operador Laplaciano ∇^2 por diferenças finitas com estêncil de 5 pontos (vizinhança de Von Neumann):

$$C_{i,j}^{**} = C_{i,j}^* + D \cdot \Delta t \cdot \left[\frac{C_{i+1,j}^* + C_{i-1,j}^* + C_{i,j+1}^* + C_{i,j-1}^* - 4C_{i,j}^*}{\Delta x \Delta y} \right]$$

Onde D é o coeficiente de difusividade (fixado em 0.2 nas simulações).

C. Decaimento e Fontes

A degradação do poluente é modelada por uma função de decaimento exponencial de primeira ordem, aplicada ao campo difundido C^{**} :

$$C_{i,j}^{t+1} = C_{i,j}^{**} \cdot e^{-\lambda \Delta t} + S_{i,j}$$

Onde λ é a taxa de decaimento (0.0010 s^{-1}) e $S_{i,j}$ representa a injeção de poluente por fontes externas pontuais.

3.3 Cenário de Simulação

Para validar o modelo, construiu-se um cenário complexo composto por:

1. **Campo de Velocidade Híbrido:** Uma correnteza uniforme ($u_x = 0.8$) sobreposta a uma perturbação rotacional (vórtice) centrada na grade, definida por um decaimento gaussiano da velocidade angular conforme a distância do centro.
2. **Fonte Contínua:** Uma emissão constante de poluente (1.5 unidades/ passo) localizada na fronteira esquerda ($x = 5$), simulando um despejo contínuo em um rio

4. Resultados e discussões

Para validar o modelo computacional, realizou-se uma simulação de longa duração ($t = 189$ passos de tempo) em uma grade de 180×110 células. O cenário configurado incluiu uma fonte pontual contínua de alta intensidade e um campo de velocidade com perturbações rotacionais (vórtices) para testar a robustez do algoritmo de advecção.

4.1 Análise Visual da Pluma de Contaminação

A Figura 1 apresenta o estado da simulação no instante $t = 189$. A escala de cores representa a concentração normalizada do poluente, onde regiões amarelas indicam alta concentração (próximo à saturação) e regiões em roxo escuro indicam ausência de contaminante.

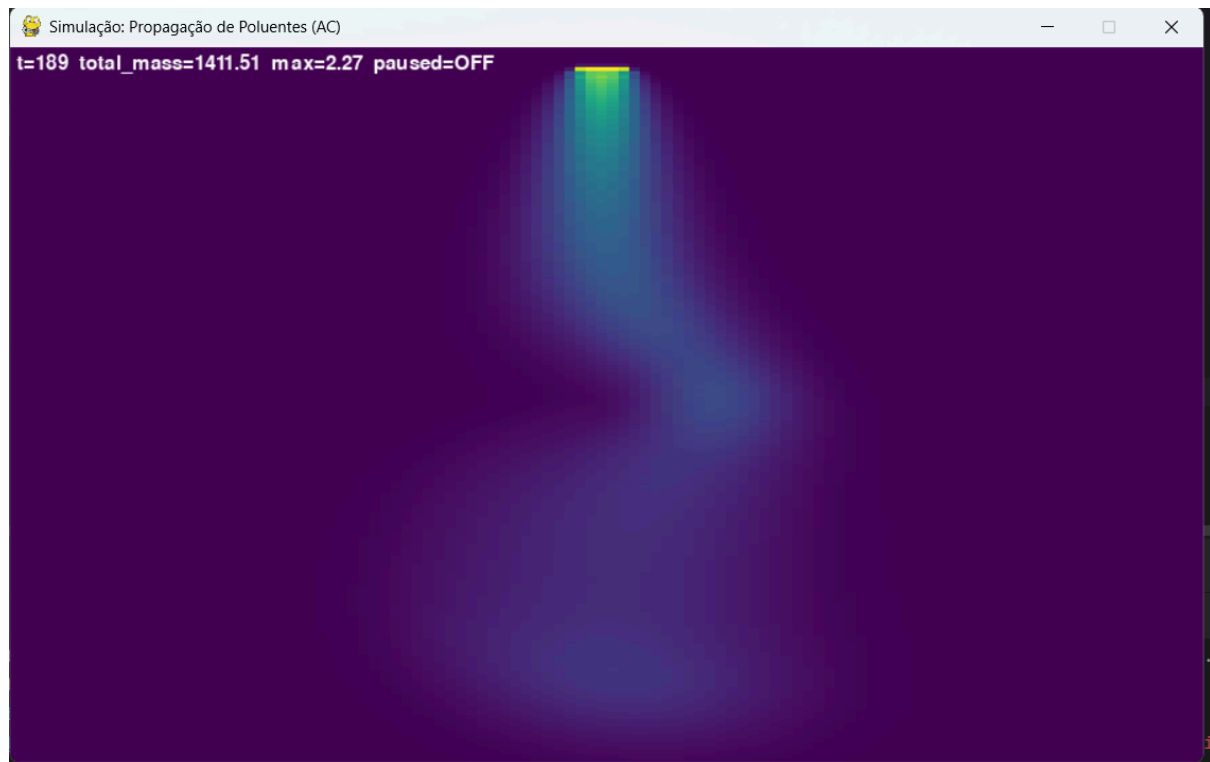


Figura 1: Visualização da dispersão do poluente em $t=189$. Nota-se o alargamento da pluma devido à difusão e a redução de intensidade devido ao decaimento.]

Observa-se a formação característica de uma pluma de dispersão (*plume*). Três comportamentos fundamentais do transporte de massa são evidenciados graficamente:

- 1. Transporte Advectivo:** O centro de massa do poluente desloca-se consistentemente na direção do campo de velocidade imposto, demonstrando que o esquema de transporte de fluxo fracionário implementado respeita a direção da correnteza sem introduzir artefatos numéricos significativos (como oscilações espúrias).
- 2. Alargamento Difusivo:** À medida que o poluente se afasta da fonte, a pluma torna-se mais larga. Isso confirma a ação do operador Laplaciano discreto, que atua suavizando os gradientes de concentração e promovendo a entropia do sistema (mistura).
- 3. Gradiente de Decaimento:** Nota-se uma transição suave de cores quentes (fonte) para frias (cauda da pluma). Mesmo com a conservação de massa local no transporte, a massa total do sistema tende a um equilíbrio dinâmico onde a taxa de injeção se iguala à taxa de decaimento acumulada, um comportamento esperado em cenários reais de autodepuração de rios.

4.2 Estabilidade e Desempenho

O uso de operações vetorizadas via NumPy permitiu que a simulação mantivesse uma taxa de quadros estável, essencial para aplicações interativas. O modelo reportou, no instante capturado, uma massa total de 1411.51 unidades e um pico de concentração de 2.27. A ausência de valores negativos ou "explosões" numéricas na grade confirma que as condições de estabilidade (CFL para advecção e $\alpha \leq 0.25$ para difusão) foram satisfeitas adequadamente.

5. Conclusão

Este trabalho apresentou o desenvolvimento e a implementação de um modelo de Autômatos Celulares de estados contínuos para a simulação de transporte de poluentes em meios hídricos. A abordagem proposta, fundamentada na discretização das equações de advecção-difusão-reação, mostrou-se capaz de reproduzir fenômenos complexos de dispersão fluidodinâmica utilizando regras locais simples e computacionalmente eficientes.

Os resultados obtidos indicam que o modelo captura corretamente a interação entre a força da correnteza e a taxa de difusão, gerando perfis de concentração fisicamente coerentes. A implementação em Python, auxiliada pela vetorização de arrays, provou ser uma ferramenta acessível e poderosa, permitindo não apenas a análise numérica, mas também a visualização pedagógica do fenômeno em tempo real.