

АНОТАЦІЯ

Файфура В.В. Математичне та програмне забезпечення для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 121 Інженерія програмного забезпечення – Західноукраїнський національний університет, Тернопіль, 2025.

Підготовка здійснювалась на кафедрі комп'ютерних наук Західноукраїнського національного університету Міністерства освіти і науки України.

Дисертаційну роботу присвячено розв'язанню важливої науково-технічної задачі – забезпечення просторового аналізу поширення мікропластику в атмосфері в умовах малих вибірок даних вимірювань шляхом розробки математичного та програмного забезпечення для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери з особливим акцентом на оцінку внеску таких значущих джерел забруднення, як об'єкти сфери поводження з ТПВ та дорожня інфраструктура.

Забруднення навколишнього середовища пластиком є однією з найбільш гострих екологічних проблем сучасності, що набуває глобальних масштабів. Атмосферне перенесення є важливим шляхом розповсюдження МП, сприяючи його виявленню навіть у віддалених регіонах планети. Приземний шар атмосфери, як безпосереднє середовище життєдіяльності людини та багатьох біологічних видів, є особливо вразливим до забруднення мікропластиком. Оцінка концентрації, складу та джерел атмосферного МП у цій зоні є критично важливою для розуміння масштабів проблеми та розробки ефективних стратегій її мінімізації.

Серед потенційних антропогенних джерел надходження МП у приземний шар атмосфери особливе місце посідають об'єкти сфери поводження з твердими побутовими відходами (ТПВ), зокрема сміттєзвалища

та підприємства з переробки пластику. На цих об'єктах відбувається інтенсивне механічне руйнування пластикових виробів, їхнє подрібнення та переміщення, що створює значний ризик емісії МП в атмосферу вітровими потоками та іншими механізмами. Іншим вагомим джерелом атмосферного МП є дорожня інфраструктура. Абразія автомобільних шин, зношування дорожнього покриття, а також розпад пластикового сміття, що потрапляє на дороги, генерують значну кількість мікропластичних частинок, які згодом піднімаються в повітря під дією руху транспорту та вітру. Саме тому у дисертаційній роботі запропоновано математичне та програмне забезпечення для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери з особливим акцентом на оцінку внеску таких джерел забруднення, як об'єкти сфери поводження з ТПВ та дорожня інфраструктура.

У першому розділі дисертації проведено аналітичний огляд проблеми поширення мікропластику, систематизовано інформацію щодо основних джерел надходження МП, які включають як первинний мікропластик (спеціально вироблені мікрогранули для промислових чи косметичних цілей), так і вторинний (утворюється при руйнуванні більших пластикових виробів). У розділі розглянуто сучасний стан методологій відбору проб МП з різних середовищ (повітря, вода, ґрунт, біота) та їх подальшого лабораторного аналізу. Також проаналізовано основні підходи до моделювання поширення мікропластику в атмосфері: Гаусові моделі, Ейлерові (АДР) та Лагранжеві моделі. Показано, що ефективна інтеграція програмного забезпечення для побудови складних динамічних моделей поширення МП та ГІС залишається складним завданням. Саме необхідність подолання цих обмежень, зокрема розробки адаптованих математичних моделей та ефективних архітектурних рішень для інтеграції розроблюваного програмного забезпечення та ГІС, формує науковий контекст та обґрунтовує актуальність і завдання даного дисертаційного дослідження.

У завершальній частині розділу здійснено постановку задачі дослідження та деталізовано основні завдання.

У другому розділі дисертаційної роботи розроблено методи для побудови моделей поширення мікропластику у безпосередній близькості до земної поверхні.

Розроблено метод математичного моделювання, що базується на фундаментальному рівнянні адвекції-дифузії-реакції. Цей підхід дозволяє врахувати основні фізичні процеси, що визначають поширення мікропластику, включаючи його поширення повітряними потоками, турбулентне розсіювання та процеси видалення з атмосфери за рахунок сухого та вологого осадження.

Для забезпечення верифікації результатів моделювання розроблено комбінований метод інтервального оцінювання МП у приземному шарі атмосфери, що поєднує етап відбору проб повітря з подальшим фізико-хімічним аналізом зібраних частинок. Запропоновано метод адаптивного налаштування параметрів моделі, що базується на оптимізації емпірично заданих коефіцієнтів шляхом мінімізації відхилення між модельованими прогнозами та експериментальними даними, отриманими в результаті застосування комбінованого методу ідентифікації МП. Такий підхід забезпечує можливість отримання моделей з гарантованими прогностичними властивостями на малих вибірках експериментальних даних, які використовуються для налаштування та верифікації моделі.

Запропоновано алгоритмічне забезпечення, описано структуру розроблених програмних модулів, їхню взаємодію та функціональні можливості, що забезпечують автоматизацію процесів обробки експериментальних даних, чисельного розв'язання рівняння адвекції-дифузії-реакції та проведення адаптивного налаштування параметрів моделей.

Третій розділ дисертаційної роботи присвячено розробці математичних моделей, що описують процеси поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери з урахуванням різних типів джерел антропогенного забруднення.

Також розглянуто методи формування вихідних даних для моделювання поширення мікропластику із застосуванням сучасних технологій геоінформаційних систем (ГІС).

В розділі розроблено модель поширення мікропластику від точкових джерел, таких як сміттєперероблювальні заводи. Модель враховує викиди мікропластику з окремих джерел та їх поширення на прилеглі території. Розроблено модель поширення мікропластику для оцінки впливу на довкілля сміттєзвалищ. Ця модель враховує специфічні процеси, пов'язані з поширенням мікропластику з поверхневих джерел забруднення (сміттєзвалищ), таких як фільтрація та вивітрювання. Також запропоновано модель поширення мікропластику у придорожніх екосистемах, де основним джерелом є знос автомобільних шин. Модель враховує особливості утворення та поширення мікропластику в умовах дорожнього руху та прилеглих територій.

Розроблені математичні моделі базуються на рівнянні адвекції-дифузії-реакції та враховують ключові фізичні процеси, що визначають поширення мікропластику у відповідних середовищах. Вони дозволяють прогнозувати просторово-часовий розподіл концентрації мікропластику залежно від характеристик джерела, метеорологічних умов, властивостей навколишнього середовища та фізичних властивостей самих частинок мікропластику.

У четвертому розділі дисертаційної роботи розглянуто особливості побудови програмного забезпечення, призначеного для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери. Описано особливості побудови архітектури програмного забезпечення для математичного моделювання поширення мікропластику. Формалізовано вимоги та спроектовано основні компоненти системи.

Наведено загальну архітектуру із наголосом на інтеграцію математичного, програмного та апаратного забезпечення у єдину безшовну систему, доступну для кінцевого користувача. Деталізовано основні компоненти підсистеми математичного моделювання, а також засоби візуалізації результатів.

Подано опис технології створення портативної вимірювальної станції, що поєднує апаратний блок збору даних із спеціалізованим програмним забезпеченням для забезпечення її роботи.

Наведено діаграми та схеми, що ілюструють особливості програмної реалізації середовища для моделювання поширення мікропластику. Спроектовано підсистеми збереження даних із врахуванням особливостей представлення просторової даних.

Практичне значення отриманих результатів полягає у створенні комп'ютерної системи для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери від джерел антропогенного походження.

Ключові слова: програмне середовище, архітектура програмного забезпечення, математичне моделювання, чисельне моделювання, моделювання атмосфери, диференціальне рівняння, моделі адвекції-дифузії-реакції, різницеве рівняння, аналіз інтервальних даних, методи оптимізації, моніторинг навколишнього середовища.

ANOTATION

Faifura V.V. Mathematical tools and software for modeling the dispersion of microplastics in the atmospheric surface layer. – Scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Philosophy in the specialty 121 – Software Engineering – West Ukrainian National University, Ternopil, 2025.

The research was carried out at the Department of Computer Science of the West Ukrainian National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine.

Thesis is devoted to solving an important scientific and technical problem – ensuring the spatial analysis of microplastic distribution in the atmosphere under conditions of limited measurement data samples by developing mathematical and software for modeling microplastic spread in the near-surface atmospheric layer, with a special emphasis on evaluating the contribution of significant pollution sources such as municipal solid waste management facilities and road infrastructure.

Environmental microplastic pollution represents one of the most pressing and globally widespread ecological challenges of our time. Atmospheric transport plays a significant role in microplastic dispersion, contributing to its presence even in remote regions of the planet. The near-surface atmospheric layer, as the immediate living environment for humans and numerous biological species, is particularly vulnerable to microplastic contamination. Accurate assessment of atmospheric microplastic concentration, composition, and sources in this zone is crucial for comprehending the problem's scale and developing effective mitigation strategies.

Among potential anthropogenic sources of microplastic release into the near-surface atmosphere, waste management facilities, particularly landfills and plastic recycling plants, hold a prominent position. These sites experience intensive mechanical degradation, fragmentation, and displacement of plastic products, creating a substantial risk of microplastic emission into the atmosphere via wind currents and other mechanisms. Another significant source of atmospheric

microplastic is road infrastructure. Abrasion of vehicle tires, wear of road surfaces, and the degradation of plastic litter on roads generate considerable quantities of microplastic particles that subsequently become airborne due to traffic movement and wind.

Therefore, this dissertation proposes mathematical and software solutions for modeling microplastic dispersion in the near-surface atmosphere, with a particular emphasis on assessing the contribution of pollution sources such as waste management facilities and road infrastructure.

The first chapter provides an analytical review of microplastic dispersion, systematizing information on primary sources, including primary microplastics (specifically manufactured microgranules for industrial or cosmetic purposes) and secondary microplastics (formed from the breakdown of larger plastic products). The chapter examines the current state of methodologies for sampling microplastics from various media (air, water, soil, biota) and their subsequent laboratory analysis. It also analyzes key approaches to atmospheric microplastic modeling, including Gaussian, Eulerian (ADR), and Lagrangian models. The study reveals that effective integration of software for constructing complex dynamic microplastic dispersion models with GIS remains a challenging task. The necessity of overcoming these limitations, specifically through the development of adapted mathematical models and efficient architectural solutions for integrating the developed software with GIS, defines the scientific context and substantiates the relevance and objectives of this dissertation research. The concluding part of the chapter formulates the research problem and details its primary objectives.

The second chapter of the dissertation focuses on developing methods for constructing microplastic dispersion models in close proximity to the Earth's surface. A mathematical modeling method based on the fundamental advection-diffusion-reaction (ADR) equation has been developed. This approach effectively accounts for key physical processes governing microplastic dispersion, including airborne transport, turbulent diffusion, and atmospheric removal processes due to dry and wet deposition. To ensure the verification of modeling results, a combined method for

interval estimation of microplastic in the near-surface atmosphere was developed, integrating air sampling with subsequent physicochemical analysis of collected particles. An adaptive model parameter tuning method is proposed, based on optimizing the specified coefficients by minimizing the deviation between modeled predictions and experimental data obtained from the combined microplastic identification method. This approach ensures the possibility of obtaining models with guaranteed predictive properties using small samples of experimental data for model fine-tuning and verification. Algorithmic support has been proposed, detailing the structure, interaction, and functional capabilities of the developed software modules that automate experimental data processing, numerical solution of the advection-diffusion-reaction equation, and adaptive model tuning.

The third chapter of the dissertation is dedicated to the development of mathematical models describing microplastic dispersion processes in the near-surface atmosphere, considering various types of anthropogenic pollution sources. Methods for generating input data for microplastic dispersion modeling using modern geographic information system (GIS) technologies are also discussed. The chapter presents a model for microplastic dispersion from point sources, such as waste processing plants, accounting for microplastic emissions from individual sources and their spread to adjacent territories. A model for microplastic dispersion to assess the environmental impact of landfills has been developed. This model considers specific processes related to microplastic dispersion from areal pollution sources (landfills), such as filtration and weathering. Additionally, a model for microplastic dispersion in roadside ecosystems, where the primary source is tire wear, is proposed. This model accounts for the peculiarities of microplastic formation and dispersion in road traffic conditions and adjacent areas. The developed mathematical models are based on advection-diffusion-reaction equations and incorporate key physical processes that govern microplastic dispersion in the respective environments. They allow for the prediction of the spatio-temporal distribution of microplastic concentration depending on source

characteristics, meteorological conditions, environmental properties, and the physical properties of the microplastic particles themselves.

The fourth chapter of the dissertation examines the specifics of developing software designed for modeling microplastic dispersion in the near-surface atmosphere. It describes the unique aspects of designing the software architecture for mathematical modeling of microplastic dispersion, formalizes requirements, and designs the system's main components. The overall architecture is presented, emphasizing the integration of mathematical, software, and hardware components into a unified, seamless system accessible to the end-user. The key components of the mathematical modeling subsystem and visualization tools for results are detailed. A description of the technology for creating a portable measuring station is provided, combining a hardware data collection unit with specialized software to ensure its operation. Diagrams and schemes illustrating the peculiarities of the software implementation of the microplastic dispersion modeling environment are presented. Data storage subsystems are designed, considering the specifics of spatial data representation.

The practical significance of the obtained results lies in the creation of a computer system for modeling microplastic dispersion in the near-surface atmosphere from anthropogenic sources.

Keywords: software environment, software architecture, mathematical modeling, computational modeling, atmospheric modeling, advection-diffusion-reaction models, differential equation, difference operator, interval data analysis, optimization methods, environmental monitoring.

ПЕРЕЛІК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковано основні наукові результати дисертації:

1. Манжула В., Файфура В. Архітектура геоінформаційної системи для моніторингу та моделювання поширення мікропластичних мас у повітрі. Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Технічні науки. 2025. Том 347. № 1. С. 512–522. (1,2 д.а. / 0,9 д.а.; особистий внесок: запропоновано методику отримання інтервальних оцінок концентрації мікропластику в точках вимірювань завислих речовин в атмосфері; запропоновано архітектурні рішення щодо розробки програмного забезпечення системи для моделювання поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери).

DOI: <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2025-347-70>.

2. Манжула В., Файфура В. Моделювання поширення концентрації мікропластику у атмосфері для об'єктів сфери поводження з ТПВ. Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: “Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка”. 2025. № 1 (40). С. 60–69. (1,1 д.а. / 0,8 д.а.; особистий внесок: розроблено математичну модель поширення мікропластику в приземному шарі атмосфери на основі рівняння адвекції-дифузії-реакції для точкових джерел антропогенного забруднення).

DOI: <https://doi.org/10.31474/1996-1588-2025-1-40-60-69>.

3. Manzhula V., Dyvak M., Melnyk A., Faifura V., Momotiuk E. Identification of Models of Static Systems with Nonlinear Characteristics Based on Interval Data Analysis. International Journal of Computing. 2025. Vol. 24. No. 1. P. 19–27. (1,0 д.а. / 0,3 д.а.; особистий внесок: проведено аналіз оптимізаційних методів з нелінійною цільовою функцією).

DOI: <https://doi.org/10.47839/ijc.24.1.3872>. (Scopus, Q3)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

4. Tymchyshyn V., Melnyk A., Manzhula V., Faifura V., Romanets I., Tymchyshyn B. The System Architecture of the Software for Modeling Harmful

Emissions in Soil. Proceedings International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT. 2023. P. 58–62. (0,5 д.а. / 0,1 д.а.; особистий внесок: запропоновано архітектурні рішення для інтеграції системи із зовнішніми програмно-апаратними комплексами).

DOI: <https://doi.org/10.1109/ACIT58437.2023.10275416> (Scopus).

5. Tymchyshyn V., Melnyk A., Faifura V., Tymchyshyn B., Mazur I.-S., Honchar L. Data Management Service Architecture of the Software for Modeling Harmful Emissions in Soil. Proceedings International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT. 2024. P. 678–682. (0,5 д.а. / 0,1 д.а.; особистий внесок: розроблено процедури сервісу управління даними для мікросервісної архітектури).

DOI: <https://doi.org/10.1109/ACIT62333.2024.10712526> (Scopus).

6. Faifura V., Spivak I., Krepych S. Context-Aware Invasive Plant Instance Synthesis for UAV-Based Crop Field Image Augmentation. Proceedings International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT. 2023. P. 614–617. (0,5 д.а. / 0,2 д.а.; особистий внесок: запропоновано алгоритм інтеграції програмних модулів для методів інтелектуального аналізу).

DOI: <https://doi.org/10.1109/ACIT58437.2023.10275663> (Scopus).

7. Файфура В., Манжула В., Файфура В. Еколого-просторові аспекти забруднення території Тернопільської області мікропластичними масами. Регіональні аспекти розвитку продуктивних сил України. 2023. № 28. С. 59–71. (1,3 д.а. / 0,8 д.а.; особистий внесок: проведено аналіз джерел забруднення мікропластиком приземистого шару атмосфери для Тернопільської області).

DOI: <https://doi.org/10.35774/rarrpsu2023.28.059>.

8. Faifura V., Bondar O., Faifura V. Ecological-Spatial Aspects of Pollution in the Region by Elastoplastic Micromasses. Економічний дискурс. 2024. № 1–2. С. 44–51. (0,88 д.а. / 0,6 д.а.; особистий внесок: проведено аналіз процесів забруднення мікропластиком приземистого шару атмосфери).

DOI: <https://doi.org/10.36742/2410-0919-2024-1-5>.

9. Файфура В., Бицюра Л., Файфура В. Забруднення довкілля мікропластичними масами в контексті моделювання його просторового поширення. Освіта, наука, бізнес, енергетичні технології: сучасний стан, проблеми та перспективи: матеріали XIII Національної науково-практичної конференції. 2024. С. 76–78. (0,1 д.а. / 0,05 д.а.; особистий внесок: аналіз та обґрунтування математичного забезпечення для моделювання поширення мікропластику в атмосфері).

<http://dspace.wunu.edu.ua/handle/316497/52354>.

10. Faifura V., Manzhula V., Tsiaputa A., Striletskyi M., Franko Y. Review of GIS Architecture for Environmental Monitoring: from Standalone Monoliths to AI-Ready Systems. CEUR Workshop Proceedings. 2023. Vol. 3974. P. 50–62. (0,75 д.а. / 0,5 д.а.; особистий внесок: проведено аналіз архітектур геоінформаційних систем та обґрунтування архітектурних рішень з інтеграції їх функціоналу з запропонованою системою).

<https://ceur-ws.org/Vol-3974/paper05.pdf>