



národní
úložiště
šedé
literatury

Rozpoznávání zdrojů organického aerosolu pomocí rozšířené faktorové analýzy

Makeš, Otakar
2013

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-161497>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 19.04.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní [nusl.cz](http://www.nusl.cz) .

ROZPOZNÁVÁNÍ ZDROJŮ ORGANICKÉHO AEROSOLU POMOCÍ ROZŠÍŘENÉ FAKTOROVÉ ANALÝZY

Otakar MAKEŠ¹, Petr VODIČKA¹, Jaroslav SCHWARZ¹, Francesco CANONACO², André PREVOT²

¹Oddělení aerosolových studií, Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Praha, makes@icpf.cas.cz

²Paul Scherrer Institute, Laboratory of Atmospheric Chemistry, CH-5232, Villigen PSI,
Switzerland

Klíčová slova: Organický aerosol, AMS, PMF, ME-2

SUMMARY

Real-time measurement of submicron aerosol was performed at Prague – Suchdol site (Czech Republic) during six weeks in June and July 2012. Organic aerosol data obtained from measurement by C-ToF AMS were deconvoluted using the Multilinear Engine (ME-2) algorithm (Paatero, 1999) and analyzed with the newly developed GUI provided by Paul Scherrer Institute (Canonaco *et al.* in prep.). During the analysis, we obtained four factor solution which explains more than 95% of the variance. These four factors, related to four aerosol sources, were fixed by the ME-2 model: Hydrocarbon-like organic aerosol (HOA) factor related to the road traffic, biomass burning organic aerosol (BBOA) factor, and two kinds of oxygenated organic aerosol factors (LV-OOA and SV-OOA). LV-OOA factor is the most frequently interpreted as an aged aerosol with low volatility. On the contrary, diurnal patterns of SV-OOA factor exhibit maxima at night and high anti-correlation with temperature. Therefore it can be assumed that SV-OOA factor represents a volatile fraction of OOA.

ÚVOD

Organický aerosol (OA) patří mezi hlavní typy aerosolu běžně se v atmosféře vyskytujících. OA může mít v čase i v prostoru velmi rozdílné složení a může pocházet z mnoha různých zdrojů přirozeného i antropogenního původu. Proto se v současné době řada vědeckých skupin soustřeďuje na dělení OA do složek podle způsobu jejich vzniku. V rámci těchto složek lze pak předpokládat podobné chemické složení.

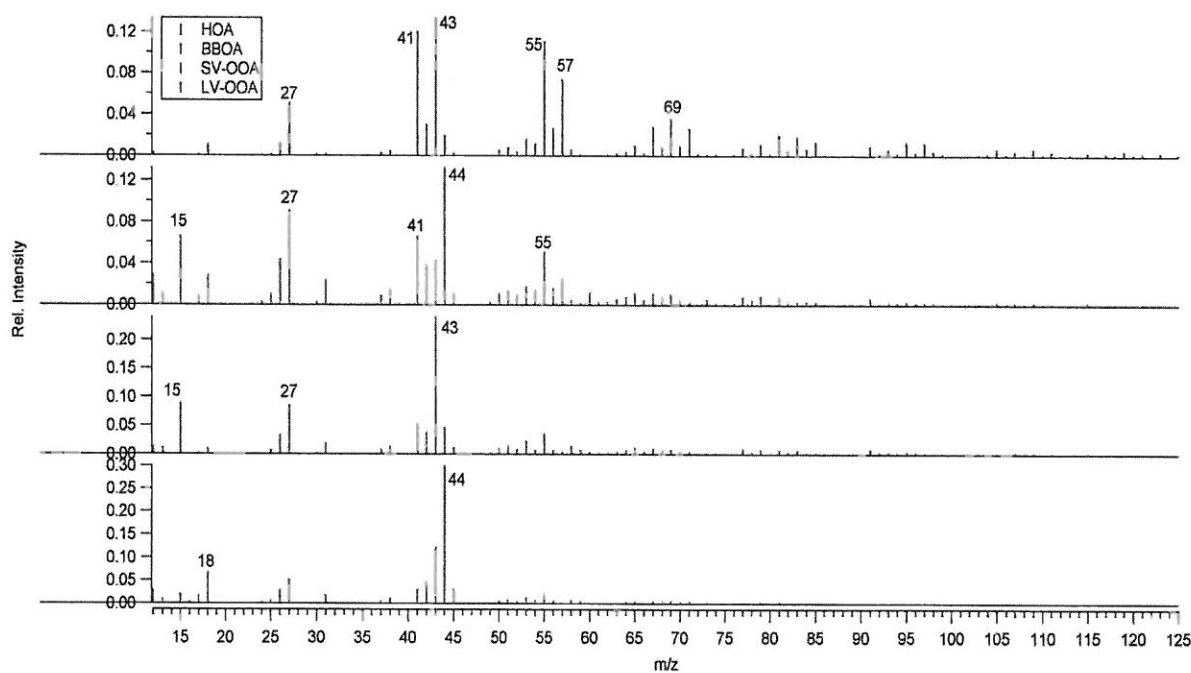
V průběhu šesti týdnů června a července 2012 proběhla v Praze v Suchdole měřící kampaň zaměřená na charakterizaci atmosférického aerosolu v reálném čase. Pomocí aerosolového hmotnostního spektrometru (C-ToF AMS, Aerodyne) byla získána data s vysokým časovým rozlišením (1 min) obsahující informace o velikostním i chemickém složení aerosolových částic menších než 1 μm . Získaná data popisující organickou složku aerosolu byla zpracována pomocí Multilinear Engine (ME-2) algoritmu (Paatero, 1999) a analyzována nově vyvinutým rozhraním poskytovaným Paul Scherrer Institutem (PSI) (Canonaco *et al.*, In prep.). V tomto abstraktu jsou prezentovány předběžné výsledky této analýzy.

VÝSLEDKY

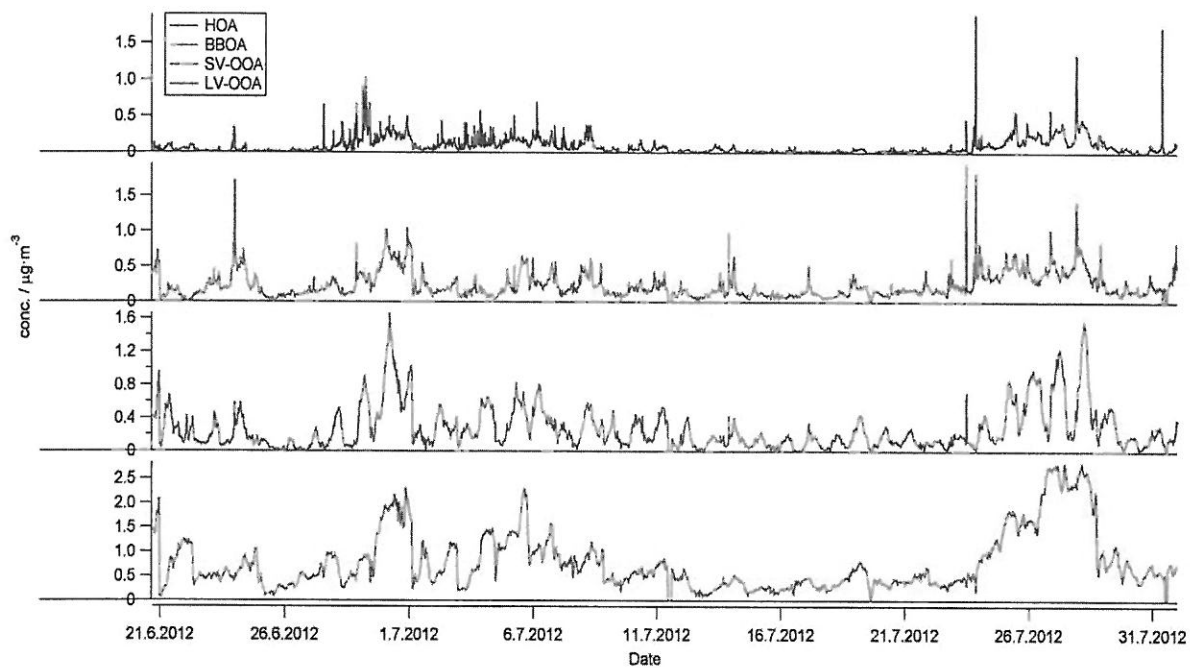
Prvním krokem, po standardním vyčištění a přípravě vstupních datových matic, bylo provedení faktorové analýzy metodou PMF (positive matrix factorization) na datech organického aerosolu (OA) získaných z AMS. Z výsledků této analýzy vyplynulo, že mezi pravděpodobné hlavní zdroje OA patří neoxidované organické aerosoly (HOA), oxidované organické aerosoly (OOA) a aerosoly vznikající při pálení biomasy (BBOA). Identifikované PMF faktory (faktorové profily) byly porovnávány s aerosolovými i plynnými tracersy (např: NO, O₃, CO) z ostatních přístrojů zapojených do měřící kampaně.

Ve druhém kroku byly PMF faktory porovnány s referenčními hmotovými spektry typickými pro jednotlivé typy aerosolu a analyzovány pomocí Chemical Mass Balance (CMB) metody. Z CMB analýzy bylo zjištěno, že čtyřfaktorové řešení získané z PMF vysvětluje více než 95% rozptylu analyzovaných dat.

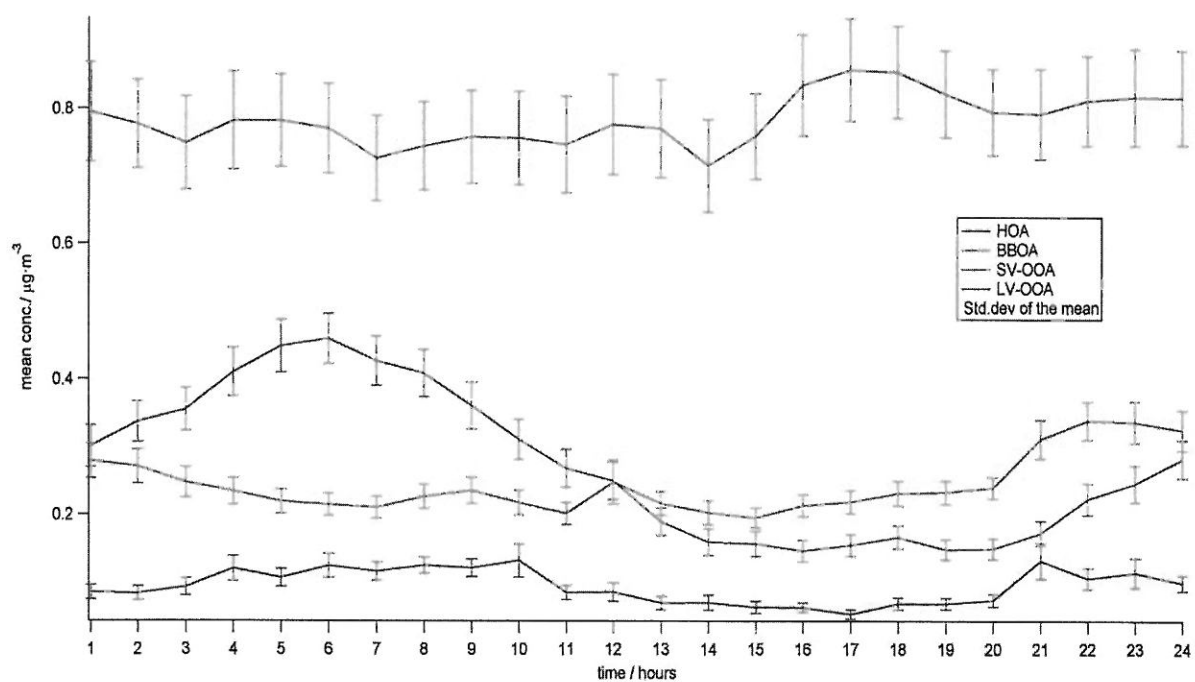
V dalším kroku lze uplatnit na řešení získané pomocí PMF a CMB přístupů techniky, které omezují rotaci řešení. V tomto případě byla na čtyřfaktorové řešení použita metoda α -value (Lanz *et al.* 2007), která může být považována za kombinaci přístupů PMF a CMB. Každému ze čtyř faktorů byla přiřazena hodnota (α -value) a externí faktorový profil (referenční spektrum typické pro určitý způsob vzniku aerosolu). Hodnota α -value určuje rozsah, ve kterém se smí faktorový profil řešení (vstupní) lišit od zadaného externího faktorového profilu (výstupní). ME-2 modelem byly identifikovány tyto čtyři faktory: HOA faktor (α -val = 0,3) související převážně s emisemi z automobilové dopravy, BBOA faktor (α -val = 0,5) a dva typy oxidovaných organických aerosolů (LV-OOA a SV-OOA). LV-OOA (low-volatile, α -val = 0,9) bývá nejčastěji interpretován jako aerosol se stářím minimálně v řádu hodin s nízkou těkavostí. Naproti tomu denní trendy SV-OOA (semi-volatile, α -val = 0,9) vykazují maxima v nočních hodinách a vysokou zápornou korelaci s teplotou. Proto můžeme předpokládat, že SV-OOA faktor reprezentuje těkavou složku OOA.



Obr. 1: Hmotnostní spektra nalezených faktorových profilů



Obr. 2: Příspěvky jednotlivých faktorů ke hmotnostní koncentraci v čase



Obr. 3: Příspěvek jednotlivých faktorů ke hmotnostní koncentraci v průběhu dne

DISKUSE, ZÁVĚR

Během letní měřicí kampaně na pražské pozad'ové stanici na Suchdole byly pomocí C-ToF AMS změřeny hmotnostní koncentrace organického aerosolu. Tato data byla poté analyzována metodou ME-2. Předběžné výsledky analýzy naznačují, že jsou přítomny oba typy oxidovaných atmosférických aerosolů (LV-OOA, SV-OOA), které byly zjištěny i dalšími vědeckými skupinami v rámci Evropy. Překvapivě nízká je koncentrace HOA, která neodpovídá velkoměstské automobilové dopravě. Vysvětlením může být, že skrze Suchdol ani v jeho blízkém okolí nevede žádná silnice s hustým provozem a aerosol ze vzdálenějších zdrojů cestou částečně zoxiduje. Tyto předběžné výsledky budou dále ověřovány, zejména porovnáním s dalšími plynnými tracery. Také bude podrobně zkoumáno řešení s pěti faktory.

PODĚKOVÁNÍ

Autoři práce děkují za podporu grantu GA ČR P209/11/1342

LITERATURA

- Canonaco F., et al. A newly developed interface for analyzing generalized Multilinear engine (ME-2) results: An example on aerosol mass spectrometer data over several months, in prep.
- Lanz VA, et al. Source apportionment of submicron organic aerosols at an urban site by factor analytical modeling of aerosol mass spectra. *Atmos Chem Phys.* 2007; 7:1503–1522.
- Paatero, P. The multilinear engine – a table-driven least squares program for solving multilinear problems, including the n-way parallel factor analysis model. *J Comput Graph Stat.* 1999;8:854–888.