

РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ МНОГОМЕРНЫМИ СТАТИСТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Антонова В.М.^{1,2}, Губанова Д.П.¹, Виноградова А.А.¹, Таловская А.В.²

¹ Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН, г. Москва, Россия

antonovavm23@mail.ru, gubanova@ifaran.ru, anvinograd@yandex.ru

² Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

talovskaj@yandex.ru

XXV Международная научная конференция (школа) по морской геологии "Геология морей и океанов" Москва, 13-17 ноября 2023 года

Введение

Аэрозоль – ключевая составляющая атмосферы, влияющая как на состояние окружающей среды, так и на климат разных природных зон и территорий. Изменчивость параметров и свойств атмосферного аэрозоля очень высока и связана с вариациями метеорологических и синоптических условий, эффективностью источников и стоков аэрозольных компонент. **Большой город** оказывает **дополнительное воздействие на все эти процессы** своим «островом тепла» и специфической химией атмосферы, содержащей также многочисленные антропогенные газовые примеси. **Элементный состав** – важнейшая характеристика аэрозоля, не только определяющая его физико-химические свойства, но и косвенно указывающая на локальные/удаленные источники загрязнения атмосферы и пути его поступления к месту наблюдений. **Изучение элементного состава аэрозоля и его сезонной изменчивости в мегаполисе – задача актуальная** как с **экологической**, так и с **климатической** точки зрения. Однако **анализ элементного состава** требует **обработки большого количества данных**. **Статистические методы помогают обнаружить в их совокупности закономерности и зависимости, позволяют установить причинно-следственную связь между составом аэрозолей и их возможными источниками, а также оценить репрезентативность и достоверность результатов**. Всё это определило **мотивацию** исследований, результаты которых представлены в данной работе.

Кластерный анализ элементного состава аэрозолей

Определено **две ассоциации элементов (рис. 1)**, характерные **для обоих сезонов (зима, весна 2021 г.): Pb-Cd и Mo-Sn-Cu-Ba-Zn-La-Co-Hf-Cr-Mn-Fe-V-Ni-P** (уровень значимости 0,68). **Выявленные кластеры химических элементов** могут указывать на **единый источник поступления элементов в атмосферный воздух** (например, **Pb и Cd от транспорта**), а также о **сходстве их природы** (терригенные элементы второй группы) и **форм нахождения в аэрозолях**.

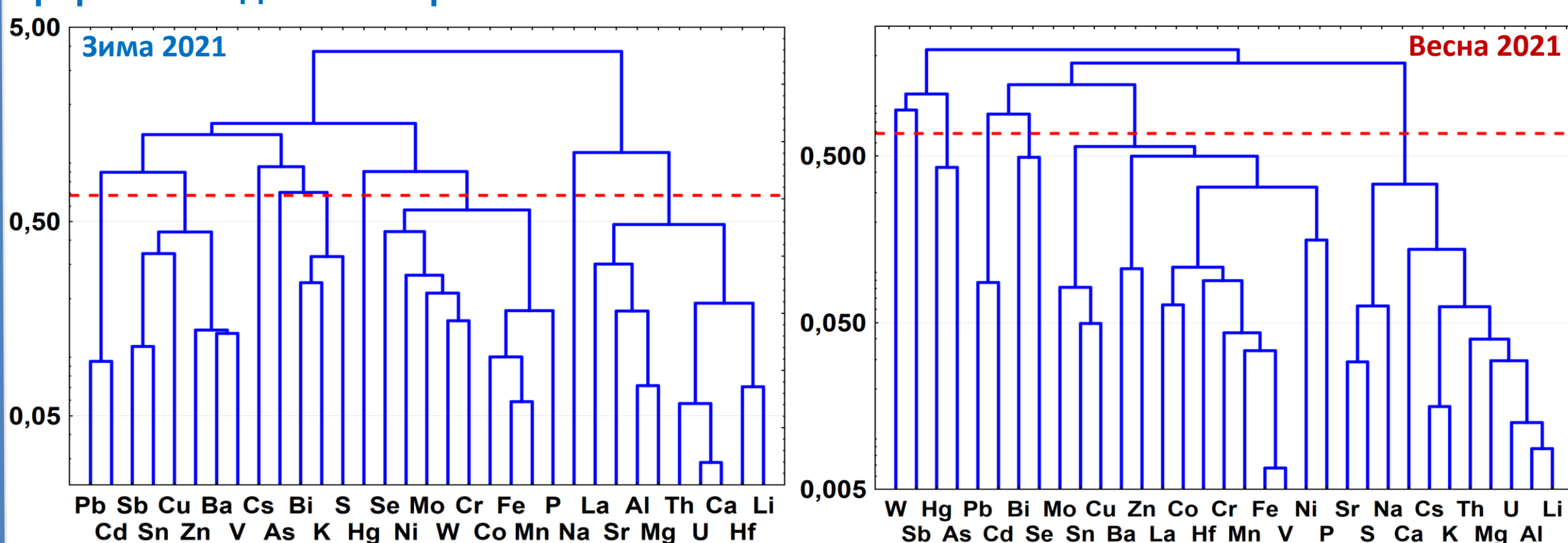


Рисунок 1 - Дендрограммы корреляционных матриц значений концентрации элементов в аэрозолях: зимой и весной 2021 г. Пунктир – уровень значимости связей, равный $1-\alpha_{0,05}=0,68$.

Предмет и методы исследований

Предмет исследований: элементный состав аэрозольных частиц в приземном слое атмосферы г. Москвы.

Методы экспериментальных исследований элементного состава:
- отбор аэрозольных проб в ходе натурных наблюдений зимой и весной 2021 г. в Институте физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН;
- лабораторный анализ аэрозольных проб с применением масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ICP-MS) и атомно-адсорбционной спектроскопии (ICP-AES).

Методы многомерного статистического анализа: факторный анализ, кластерный анализ, критерии Колмогорова-Смирнова и Манна-Уитни с использованием современного программного пакета «Statistica».

Многофакторный анализ

В каждый сезон определено **2 фактора**, объединяющих элементы в группы (см. **табл.**).

Зима 2021 г.

Фактор 1 - наиболее значимый, доминирующий, характеризуется **крупной ассоциацией элементов с положительной корреляционной связью**. Значимо **не связан с метеопараметрами**. Объясняет **43% дисперсии** распределения содержания химических элементов в аэрозолях и включает **редкие и редкоземельные, радиоактивные элементы, тяжелые металлы 1, 2 и 3 класса опасности**, а также **макроэлементы, свойственные составу дорожной и строительной пыли**.

Фактор 2 объясняет **27% дисперсии**, положительно связан с **большой ассоциацией элементов и атмосферным давлением (Po)**, и **отрицательно – со скоростью ветра (Ff)**, т.е. **этот фактор описывает формирование элементного состава при неблагоприятных метеорологических условиях (НМУ)**.

Весна 2021 г.

Фактор 1 объясняет **69% дисперсии** содержания химических элементов в аэрозолях. **Состав этой группы** включает все элементы, объединенные **Фактором 1 зимой**, а также **большинство элементов из зимнего Фактора 2**. Вероятно, **весной на поверхности оттаивающей влажной почвы активизируются процессы эмиссии и стока химических элементов в атмосферу и из нее**.

Фактор 2 описывает лишь **10% дисперсии**, но имеет **отрицательные, высокие по абсолютной величине коэффициенты для западного направления ветра (DD=3)**, а также для **элементов S, As и Hg**, что может указывать на **глобальное или антропогенное распространение** этих элементов **преимущественно с восточных направлений**.

Таблица – Химические элементы*, имеющие значимые (> 0.5) факторные нагрузки в рассматриваемых аэрозолях весной и зимой 2021 г. *Цветом показаны одинаковые.

	Фактор 1	Фактор 2
Зима	Li, Mg, Al, P, Ca, Mn, Fe, Co, Sr, Hf, W, Th, U	(Po), (Ff), P, S, K, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Se, Mo, Cd, Sn, Sb, Cs, Ba, La, W, Pb, Bi
	Li, Na, Mg, Al, P, S, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Se, Sr, Mo, Cd, Sn, Sb, Cs, Ba, La, Hf, Pb, Bi, Th, U	(DD=3), S, As, Hg

Анализ с применением критериев Колмогорова-Смирнова и Манна-Уитни

Выявлены **статистически значимые высокие уровни накопления ($p \leq 0.001$) элементов (Li, Na, Mg, Al, P, S, K, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Sr, Mo, Cd, Sn, Sb, Cs, Ba, La, Hf, W, Hg, Pb, Bi, Th и U)** в аэрозоле **в разные сезоны одного и того же года (рис. 2)**, что свидетельствует о **схожих факторах в поступлении** рассматриваемого спектра элементов. Весной концентрация почти всех элементов в воздухе города больше, чем зимой. Исключение составляют **As, Se, Cd, Pb, Bi**.

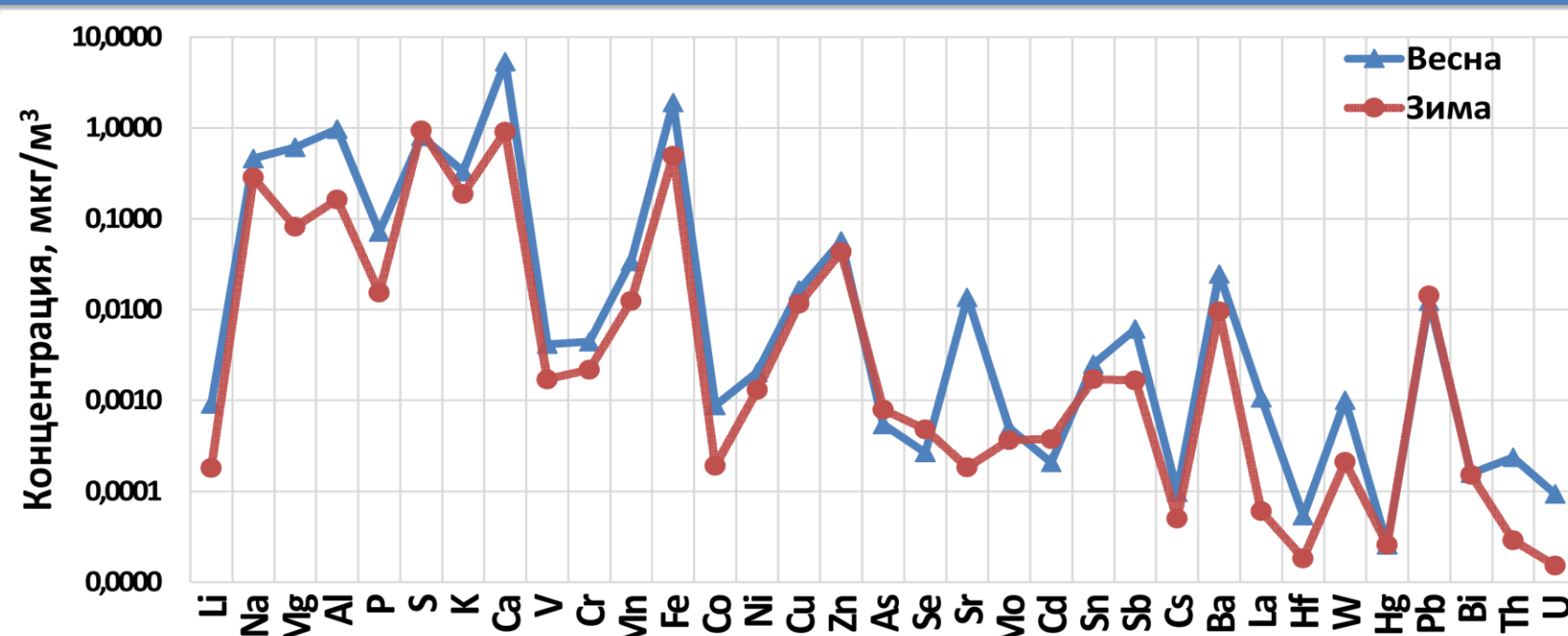


Рисунок 2 - Средняя концентрация химических элементов в аэрозолях в разные сезоны 2021 г.

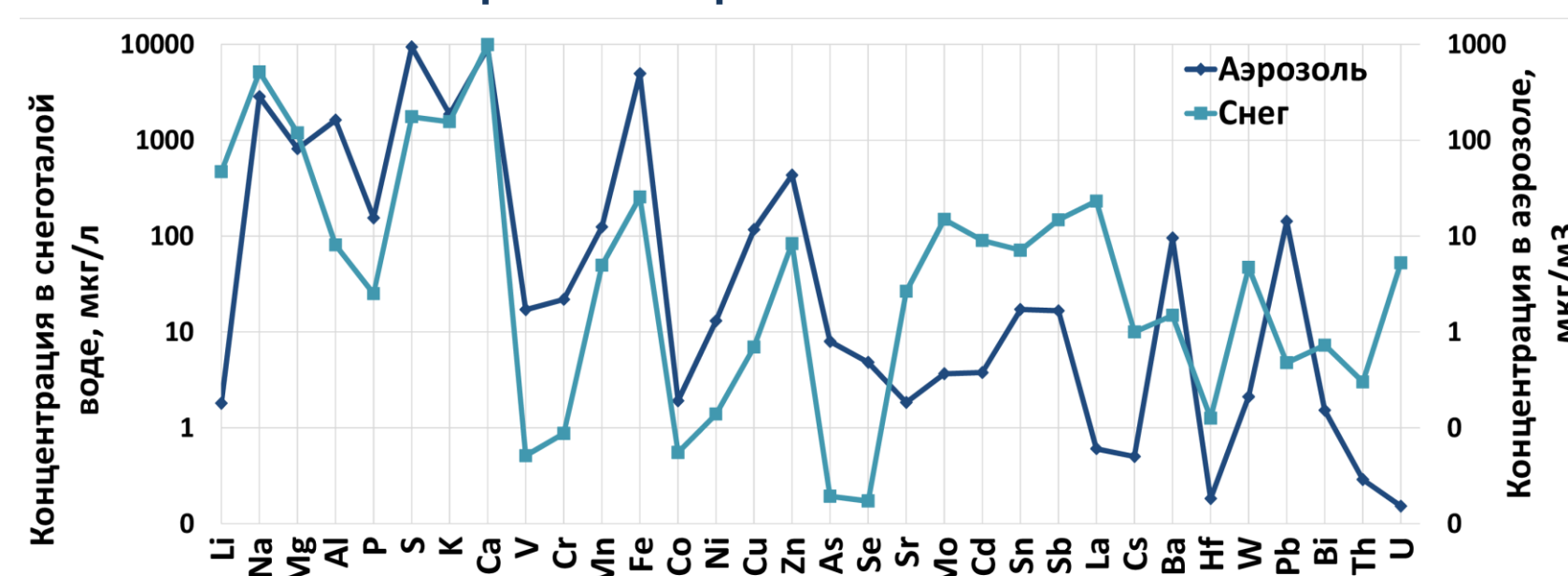


Рисунок 3 - Средняя концентрация химических элементов в аэрозолях и в снеготалой воде зимой 2021 г.

В **элементном составе снеготалой воды** с использованием **теста Колмогорова-Смирнова** выявлено **достоверно значимый высокий уровень накопления всех рассматриваемых элементов**. Также обнаружена **умеренная положительная корреляция содержания W в аэрозоле и в снеготалой воде**. Установлено, что **Cs в аэрозоле положительно коррелирует с Ca, Sr, Cd, La, Co, Ni, Ba, Mn в снеготалой воде**, а **W в аэрозоле – с Sb и Bi в снеготалой воде**. **Различия в уровнях накопления элементов в снеготалой воде и аэрозоле (рис. 3)** свидетельствуют о **разных факторах и механизмах накопления** изучаемого спектра элементов в аэрозоле и в снежном покрове, в частности, о **разной степени растворимости** элементов.

Выводы

По данным регулярных наблюдений физико-химических характеристик аэрозоля в Институте физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН методами многомерного статистического анализа выполнен анализ элементного состава приземного аэрозоля в Москве зимой и весной 2021 года. Это позволило выделить разные группы элементов, обусловленные условиями их формирования, а также выявить значимые различия в уровне содержания элементов в приземном воздухе при переходе от зимы к весне.

Применение многомерных статистических методов при анализе элементного состава аэрозолей позволяет выявить не только схожие кластеры химических элементов, которые могут указывать на их природу и общий источник их поступления в атмосферу, но и обнаруживать причины сходств и различий в метеорологических условиях. **Многомерный анализ способствует повышению надежности получаемых сопоставительных результатов и конкретизации задачи при изучении процессов формирования в атмосферном аэрозоле различных компонентов.**