

源解析模型在颗粒物成分 数据分析中的应用

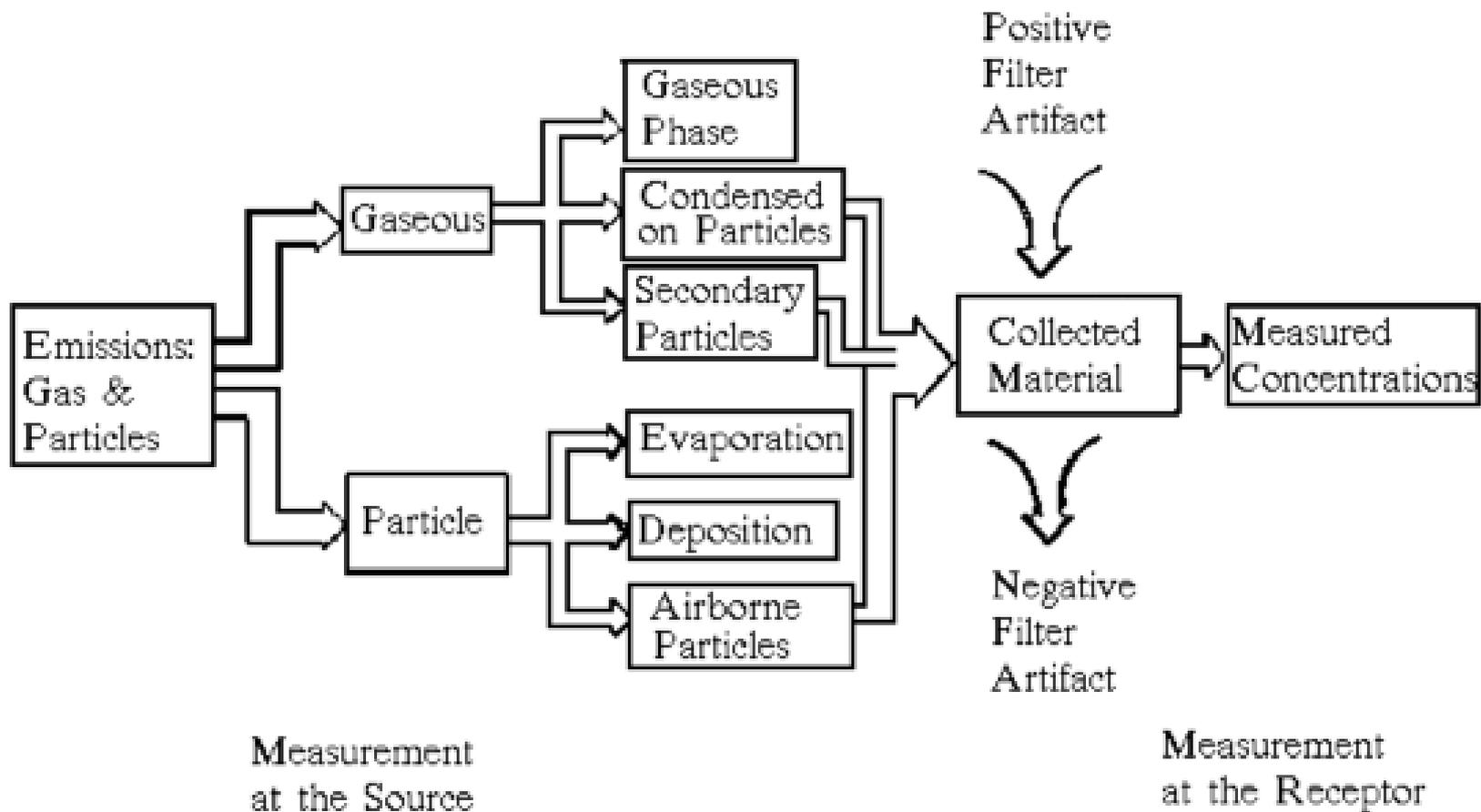
Philip K. Hopke

克拉克森大学可持续环境研究所

空气质量管埋

- 虽然一些地区在改善空气质量方面付出了大量的努力，然而还有许多地区依然有很长的路要走。
- 为了实现这一目标，我们需要制定一种卓有成效的控制策略，我们将这一策略的目标放在问题的重要根源上。
- 在制定策略的过程中，最常用的就是化学传输模式，但辅助信息往往也会发挥重要的作用，甚至可以说是必不可少的。

受体模型



大气颗粒物的质量平衡

受体模型的基本原则是假设质量守恒，质量平衡解析可用于识别大气颗粒物的来源。



质量平衡

在以下质量平衡方程中，我们可以将其解释为从 p 个独立来源获取的 n 个样本中的 m 个化学物质。

$$X_{ij} = \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj}$$

其中， $i = 1, \dots, n$ 样本， $j = 1, \dots, m$ 化学物质， $k = 1, \dots, p$ 独立来源



受体模型

- 要解开这一方程式，接下来的问题是要了解什么是*已知的*。
- 我们将这一问题分为两大类
 - 已知的排放源成分谱
 - 未知的排放源成分谱

受体模型

- 已知的排放源成分谱
 - 化学质量平衡
 - 多元校正方法
 - 偏最小二乘法
 - 人工神经网络
 - 模拟退火算法
 - 遗传算法



质量平衡

质量平衡方程可以改写为一个回归问题，其中成分谱和环境浓度是已知的。

$$x_j = \sum_{k=1}^p g_k f_{kj} + e_j$$

现在，这一方程每次只能代表一个样本。



历史回顾

- 最初，我们用单一的化学物质来估计具体的来源。
- 然而，给定的化学物质可能源于多个排放源。
- 弗里德兰德（*Environ. . Sci Technol.* 7, 235-240, 1973）首次提出用普通最小二乘法（OLS）来解决这个问题。

历史回顾

- 然而，不同化学元素的浓度也是不同的。
 - 大量元素，如铝、硅、铁
 - 微量元素，如钒、锰、铬
 - 痕量元素，如镧、铈、砷、硒
- 普通最小二乘法过分强调了浓度较大的化学物质。
- 我们需要通过加权分析来平等考虑所有化学物质。

历史回顾

- 科瓦尔奇克等人（Atm. Env 12, 1143-1153）提出了普通加权最小二乘法（OWLS）
- 加权最小二乘法的标准目标函数为：

$$Q = \sum_{j=1}^m \frac{(x_j - \sum_{k=1}^p g_k f_{kj})^2}{\sigma_j^2}$$

历史回顾

- 1979年，约翰·沃森（John Watson）和艾伦·丹克尔（Alan Dunker）认识到，普通的回归分析是不正确的，因为其对排放源成分谱的测量会出现错误。

$$x_j = \sum_{k=1}^p g_k f_{kj} + e_j$$

历史回顾

- 两人提出了有效方差最小二乘法。
- 有效方差最小二乘法（EVLS）采用了一种拟合的目标函数，如下所示：

$$Q = \sum_{j=1}^m \frac{\left[x_j - \sum_{k=1}^p g_k f_{kj} \right]^2}{\sigma_j^2 + \left[\sum_{k=1}^p g_k \sigma_{jk} \right]^2}$$

历史回顾

- 这一问题不能以闭合形式来解决，但可以迭代求解。
- 这一问题被称为化学质量平衡（CMB）。
- 由Cooper, J.A., Watson, J.G., Huntzicker, J.J.（1984）在《有效方差加权最小二乘法在质量平衡受体模型中的应用》，大气环境，18，1347-1355中提出。
- 1988年，EPA将其编入CMB软件中。



化学质量平衡

- 化学质量平衡（CMB）模型已被广泛用于美国西部的PM10来源解析和细颗粒有机碳解析中，这一模型是基于对已故格伦·卡斯（Glen Cass）和他的学生通过一些源排放试验而确定的特定有机物（“分子标记”）的解析而建立的。





化学质量平衡

- 在化学质量平衡的应用中，一个关键问题就是要了解成分谱。
- 对排放物进行取样是一个困难而又耗费成本的工作，在过去的15年间，除汽车尾气外，我们很少对其他排放源进行研究。因此，许多成分谱可能会过时。
- 就特定排放源来说，我们对成分谱中各成分的可变性几乎一无所知。

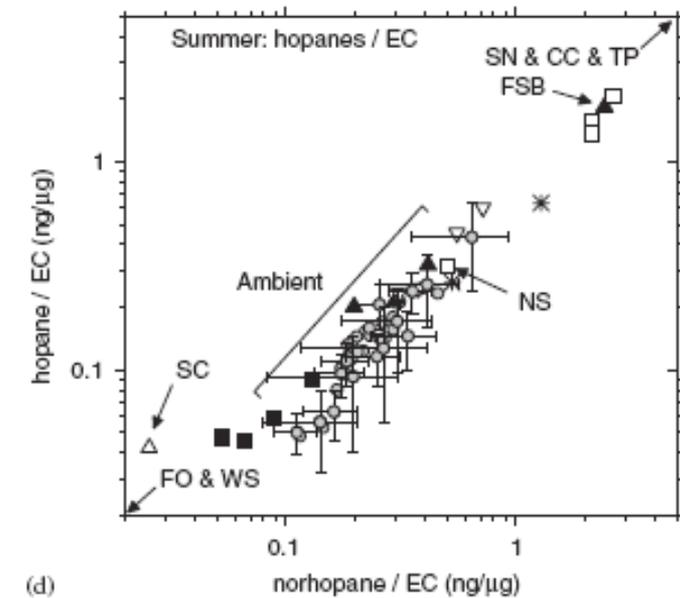
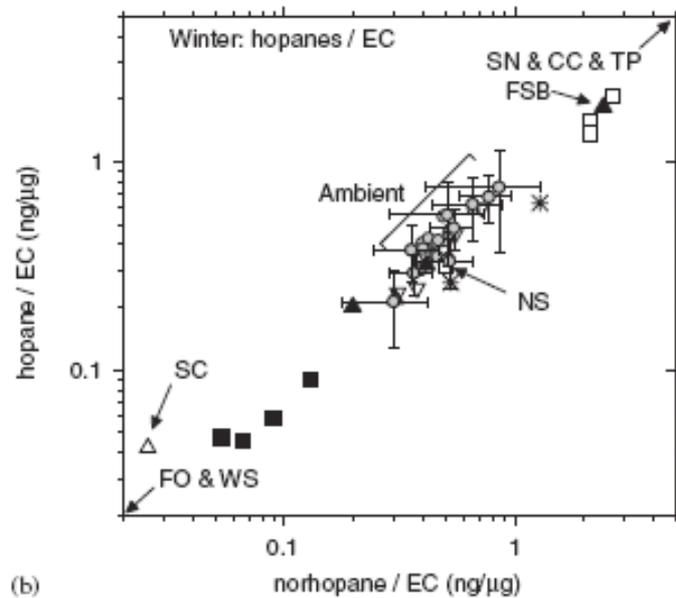
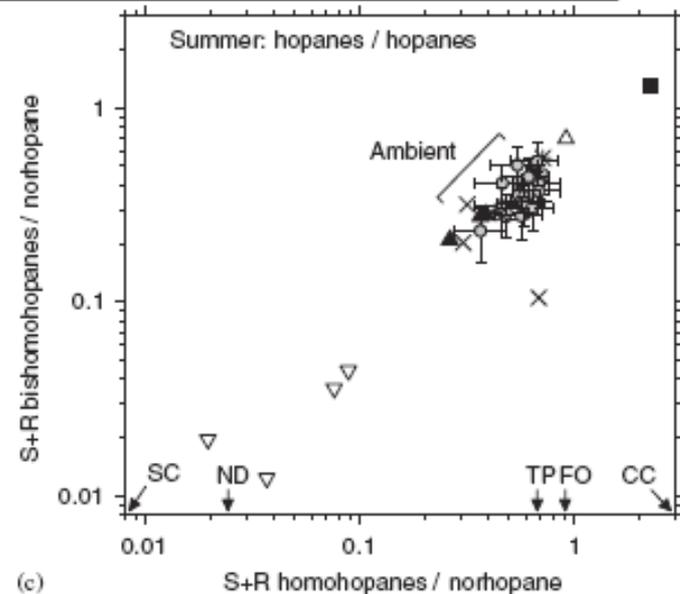
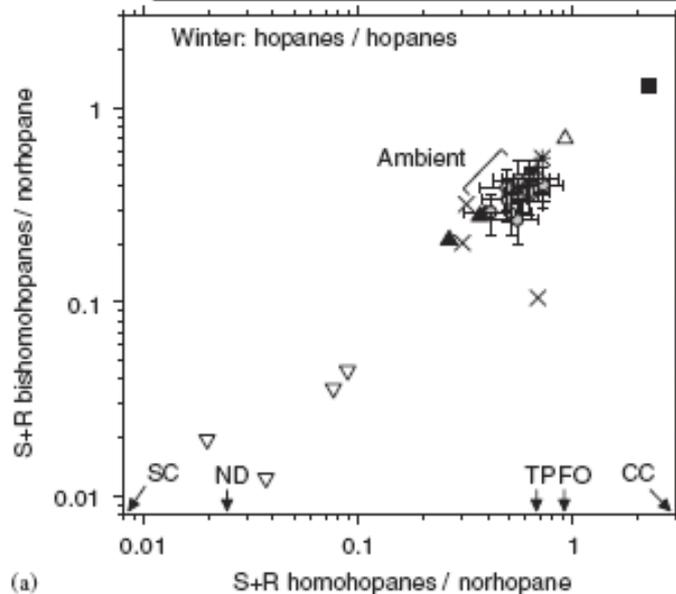
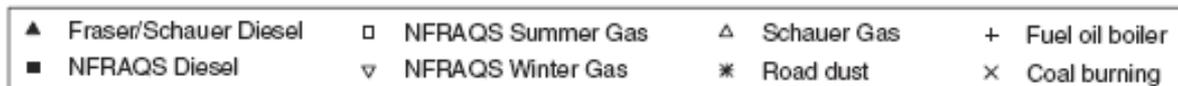




化学质量平衡

- Subramanian等人（大气环境，40（2006）8002-8019）曾利用从匹兹堡超级测站获取的数据对现有移动源成分谱的适用性进行了研究。
- 他们利用比值图对环境数据和排放源成分谱进行了比较。







化学质量平衡

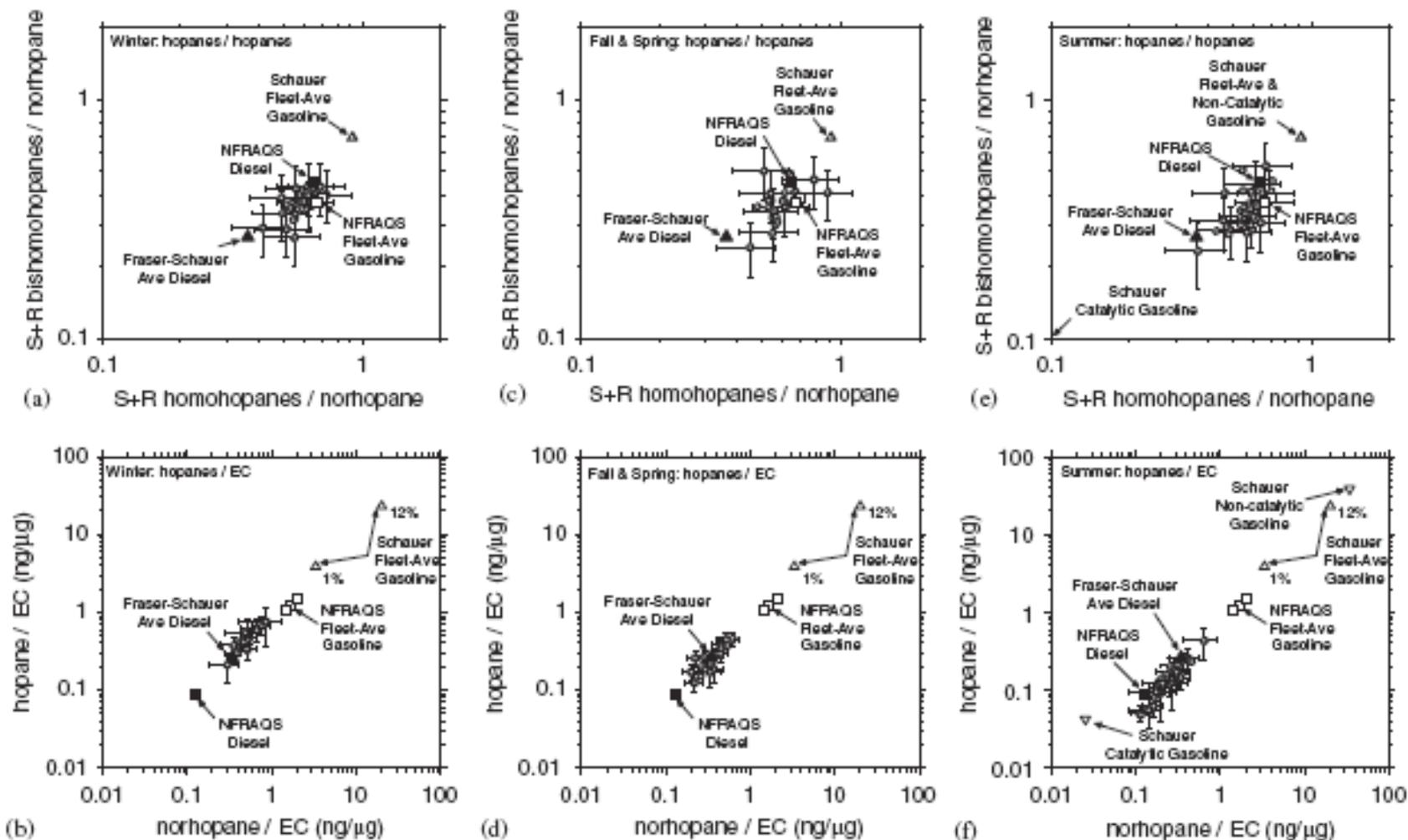


Fig. 4. Ratio-ratio plots showing different CMB scenarios and ambient data for the (a and b) winter, (c and d) spring and fall, and (e and f) summer. Gray circles are ambient data; solid symbols are diesel vehicle profiles and open symbols are gasoline vehicle profiles. Error bars on select ambient data represent the propagated analytical and sampling uncertainties.



化学质量平衡

- 相对于组织良好的环境数据来说，排放源成分谱有一个最突出的特点：可以广泛分布不同机动车辆的排放源成分谱。因此，排放源成分谱要比环境数据具备更大的可变性，这一事实不足为奇。





化学质量平衡

- 每个排放源成分谱表示一个或几个车辆的排放物，而环境数据则代表所有车辆的总排放量。组织良好的环境数据表明，大气混合测量使车辆对车辆的排放量差异得到平衡。





化学质量平衡

- 基于这些结果，他们研发了“车队均值”成分谱，并着手进行化学质量平衡分析。
- 为探讨排放源的不确定性范围，他们已对多个方案进行了研究。





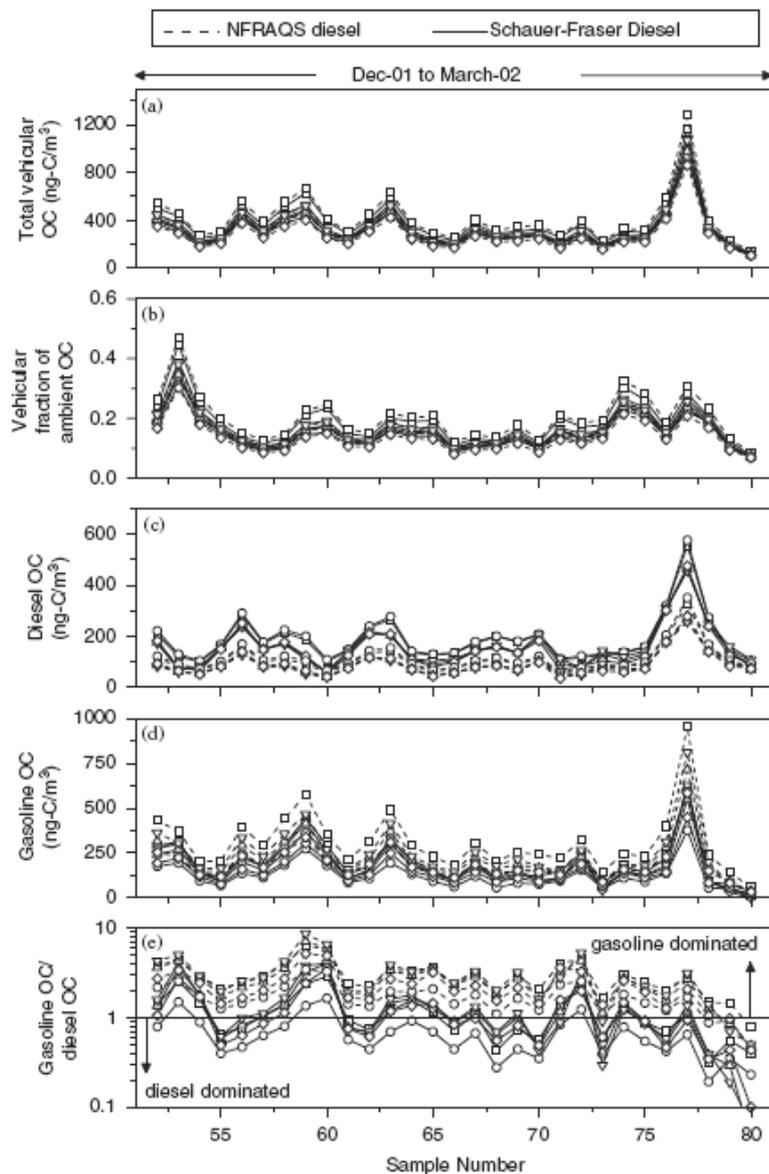
化学质量平衡

- 下图显示了冬季化学质量平衡方案的时间序列：（1）车辆总量OC，（2）作为环境OC一小部分的车辆总量OC（3）汽油车辆OC，（4）柴油车辆OC，以及（5）汽油车辆OC和柴油车辆的比值。





化学质量平衡



- 实线代表绍尔-弗雷泽柴油车辆平均成分谱的计算结果；虚线代表NFRAQS柴油成分谱的计算结果。符号表示汽油车辆的平均成分谱： \square 1%高排放绍尔汽油； \circ 12%的高排放绍尔汽油； \diamond 1%高排放NFRAQS汽油； Δ 6.8%的高排放NFRAQS汽油；以及 ∇ 12%的高排放NFRAQS汽油。



化学质量平衡

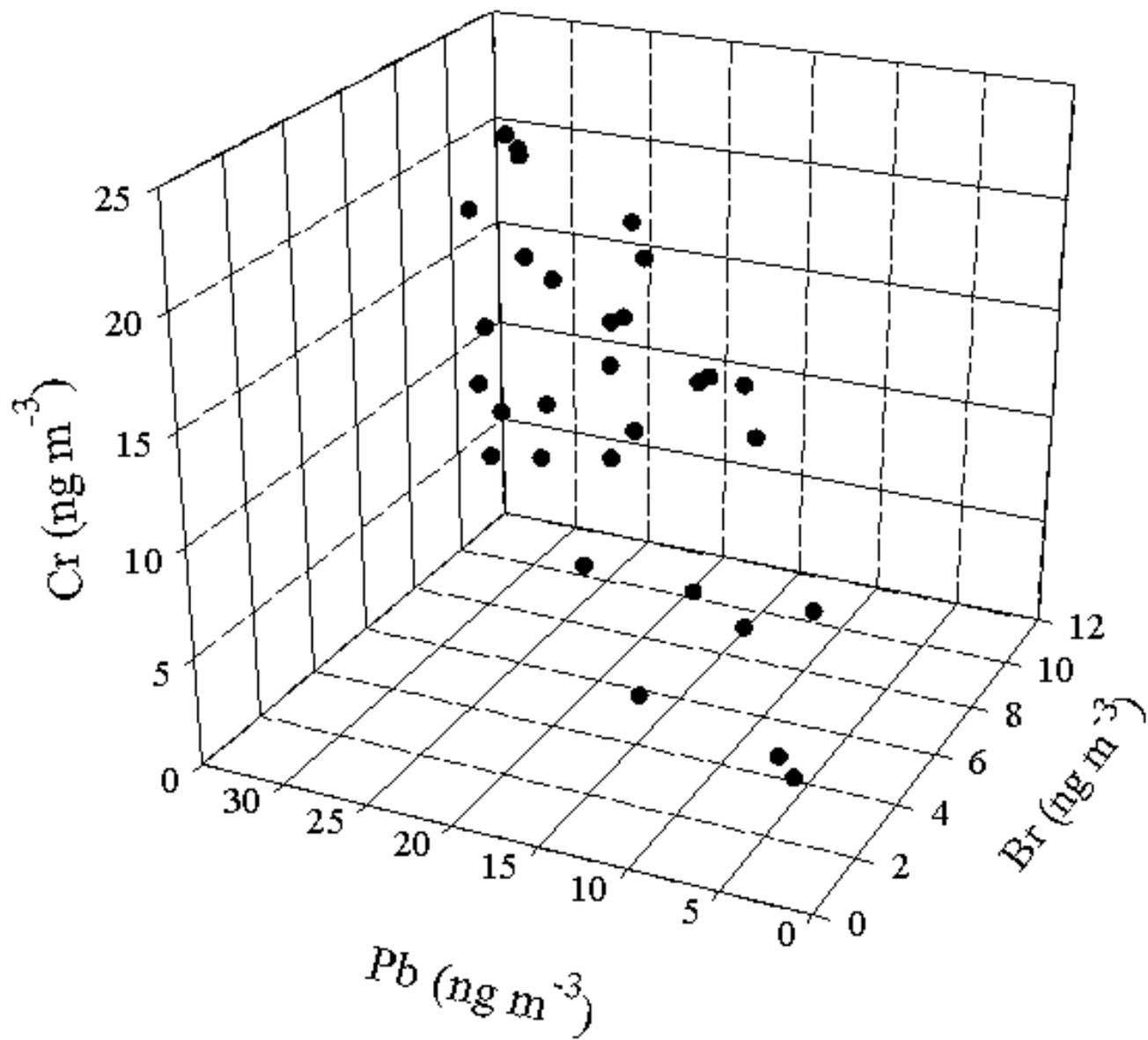
- 因此，一般情况下，在建立化学质量平衡模型时，可能不能获取最新的和本地相关的成分谱。
- 但是，我们能获取有限的本地成分谱，利用这些信息，我们就能利用某些方法。



受体模型

- 未知的排放源成分谱
 - 因子分析
 - 主成分分析
 - 绝对主成分分析
 - **SAFER/UNMIX**
 - 正矩阵因子分解





因子分析

大多数因子分析都是基于特征向量分析而进行的。在特征向量分析中，可以表明 [Lawson and Hanson , 1974; Malinowski , 1991], 在最小二乘法中，通过以下方程，估计值X应能得出最小值：

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (e_{ij})^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj})^2$$



因子分析

- 数据中的错误是不相等的。因此，未加权的最小二乘法不适用于这种数据，同时还表示不正确的加权最小二乘法可以适用。

因子分析

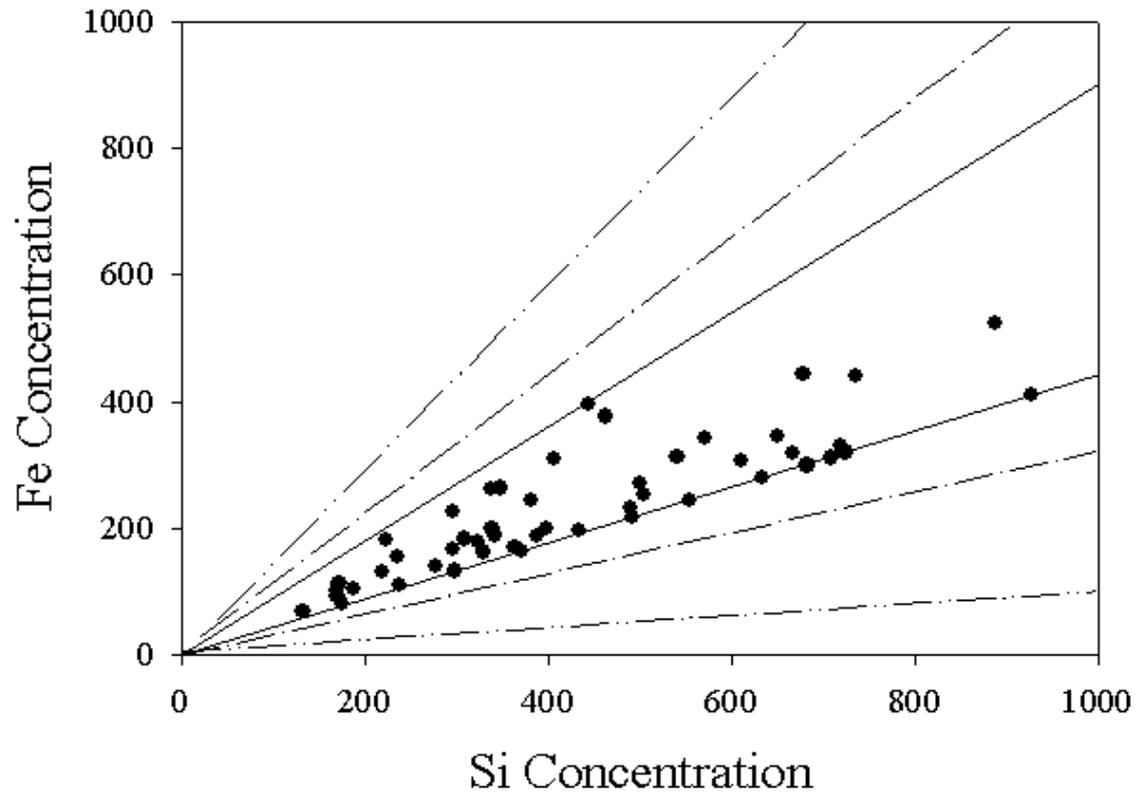
这一问题可以得到解决，但解决方案并不是一种**独一无二**的。我们可能需要对以下方程进行转化：

$$X=GT T^{-1}F$$

其中**T**代表变换矩阵的一个潜无穷。这种转变是循环的，通常计算在内，以产生更接近真实排放源成分谱的因子。



因子分析



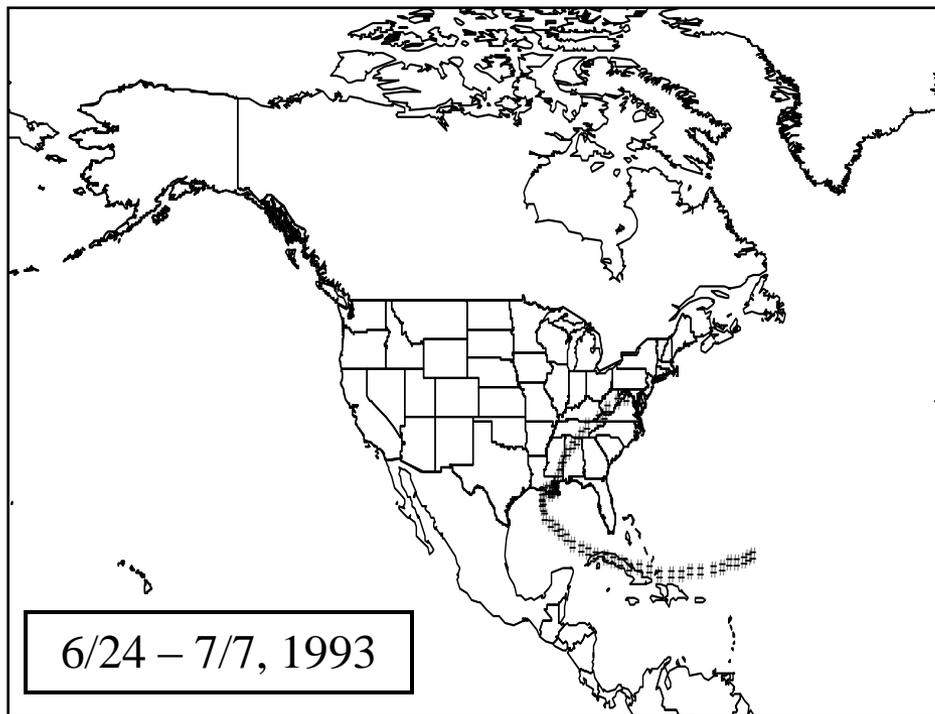
步进法

- 检查数据
- 进行不确定性估算
- 确定因子数量
- 探索循环空间
- 质量分配
- 解释

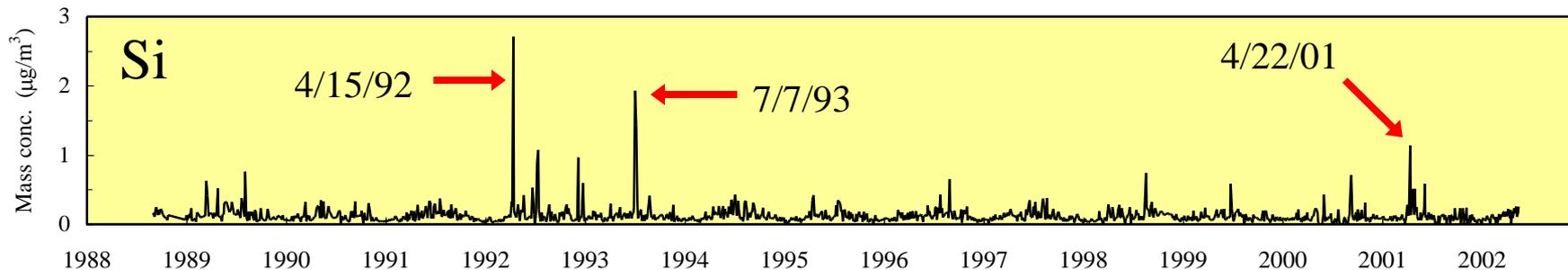
数据准备

- 检查数据，发现异常值、不寻常事件、极端值
 - 时间序列图
 - 散点图（矩阵图）
 - PCA
 - 质量平衡

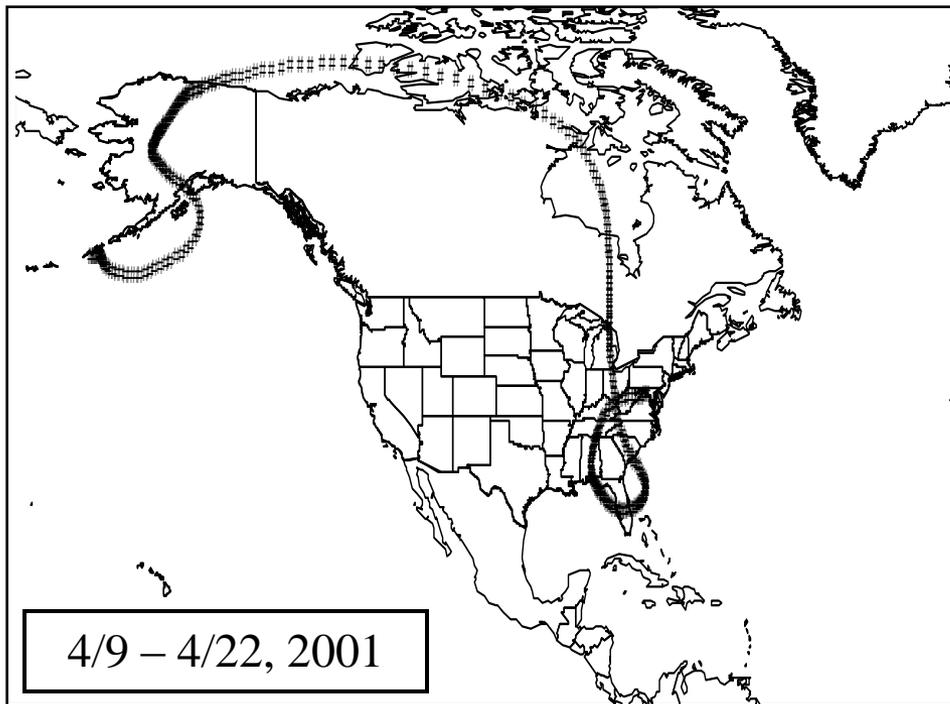
硅1



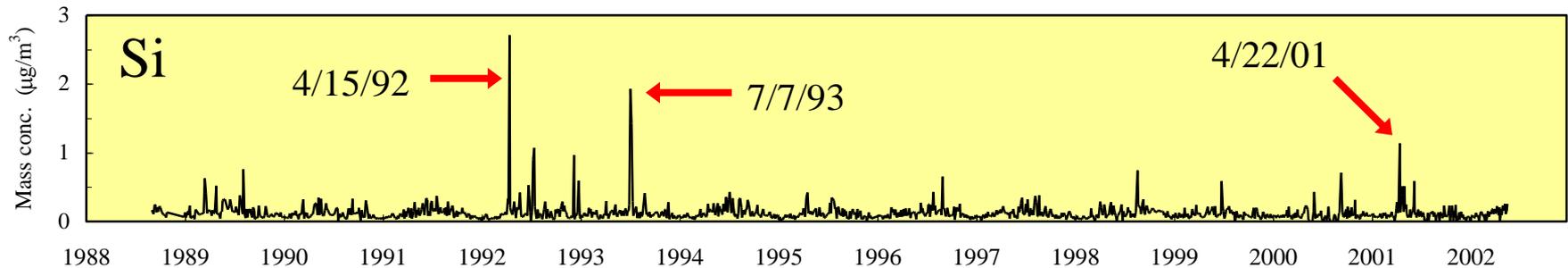
- NOAA HYSPLIT模型主要用于计算高硅天气大气气团的后向轨迹。



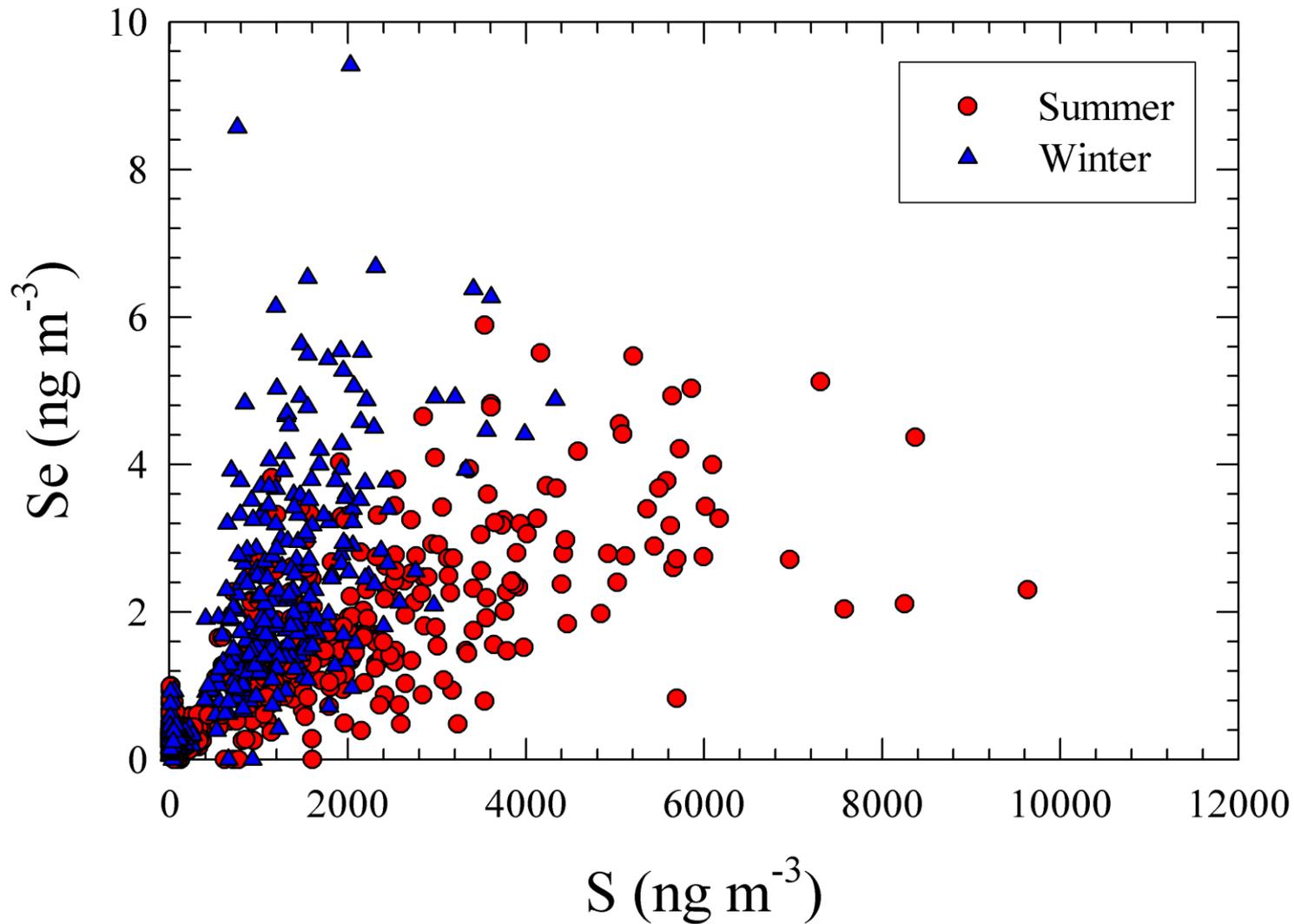
硅2

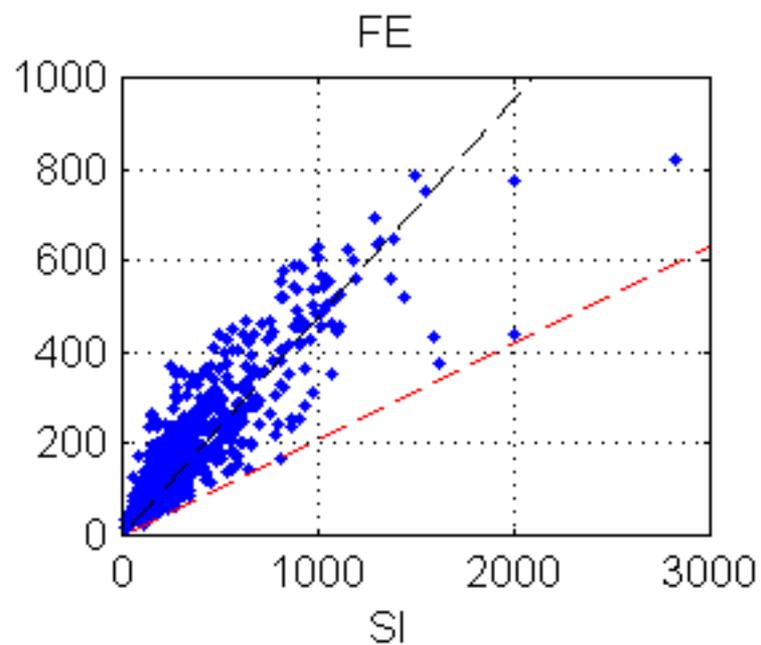
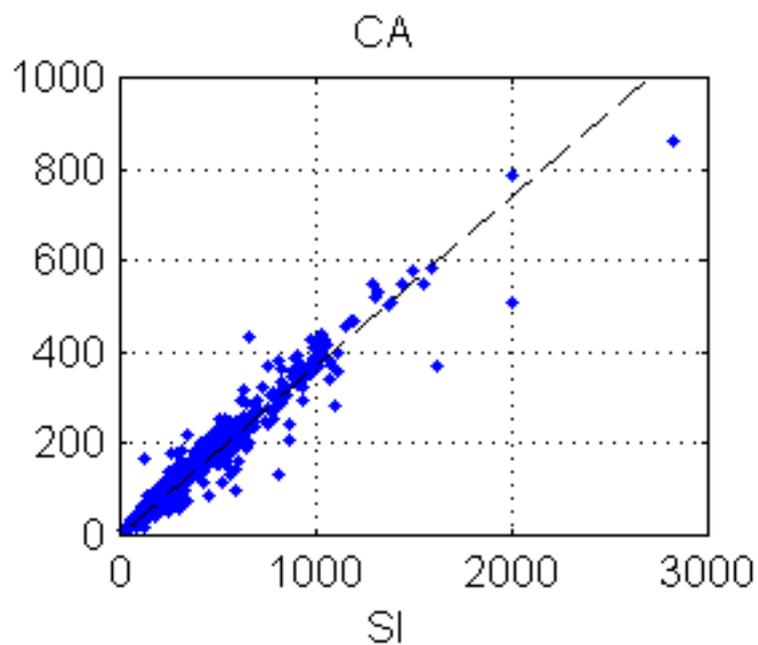
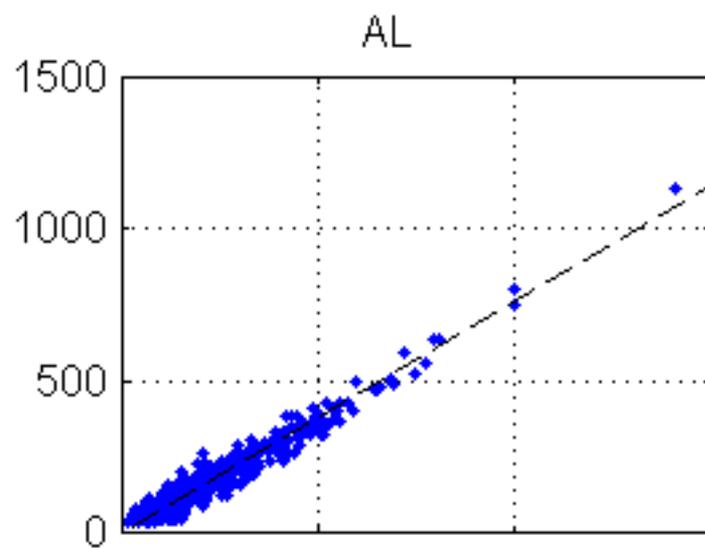
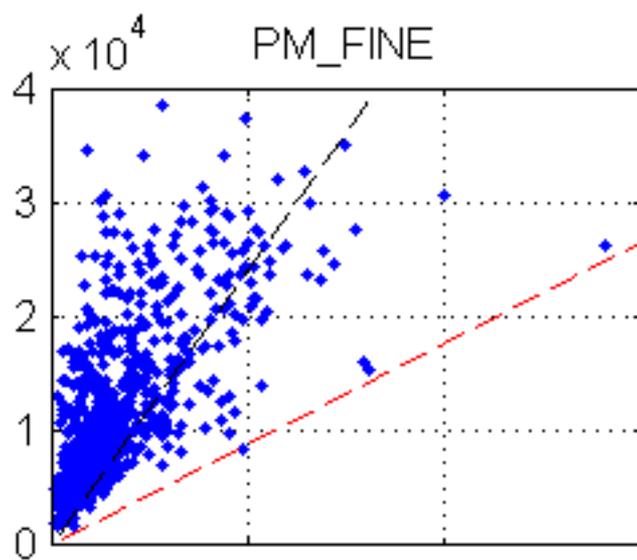


- 亚洲的尘埃云
 - 4/6: 在蒙古空中形成
 - 4/13: 开始影响西海岸

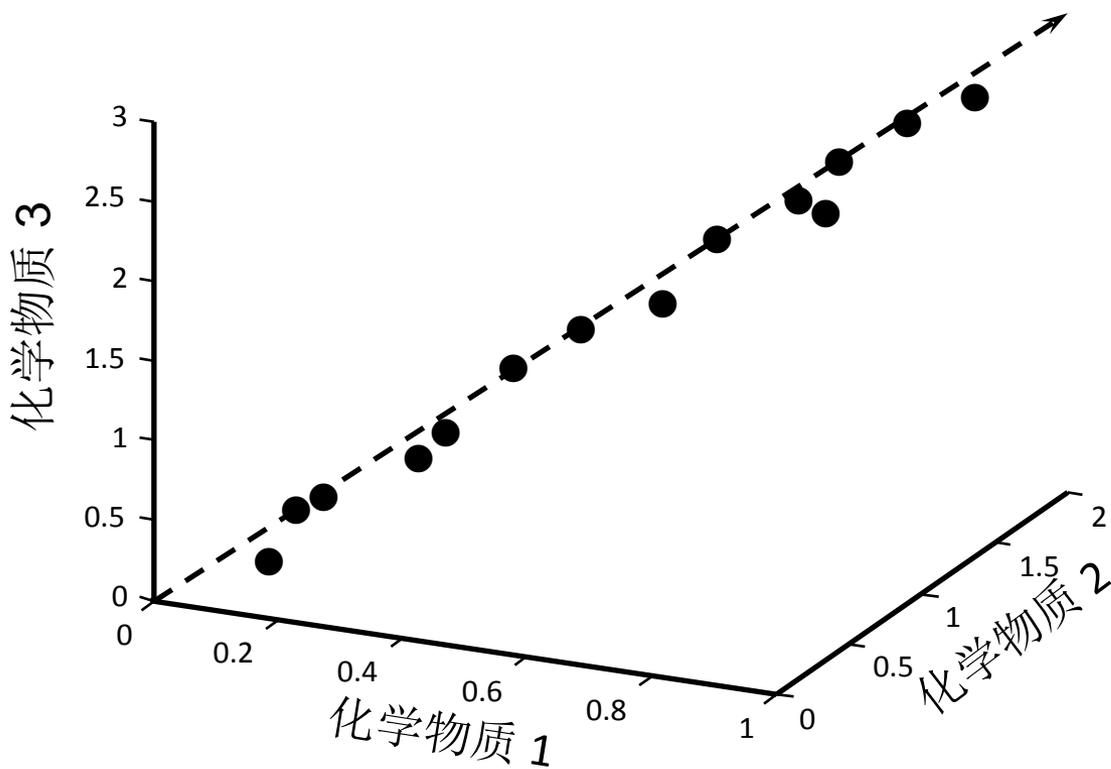


硒和硫

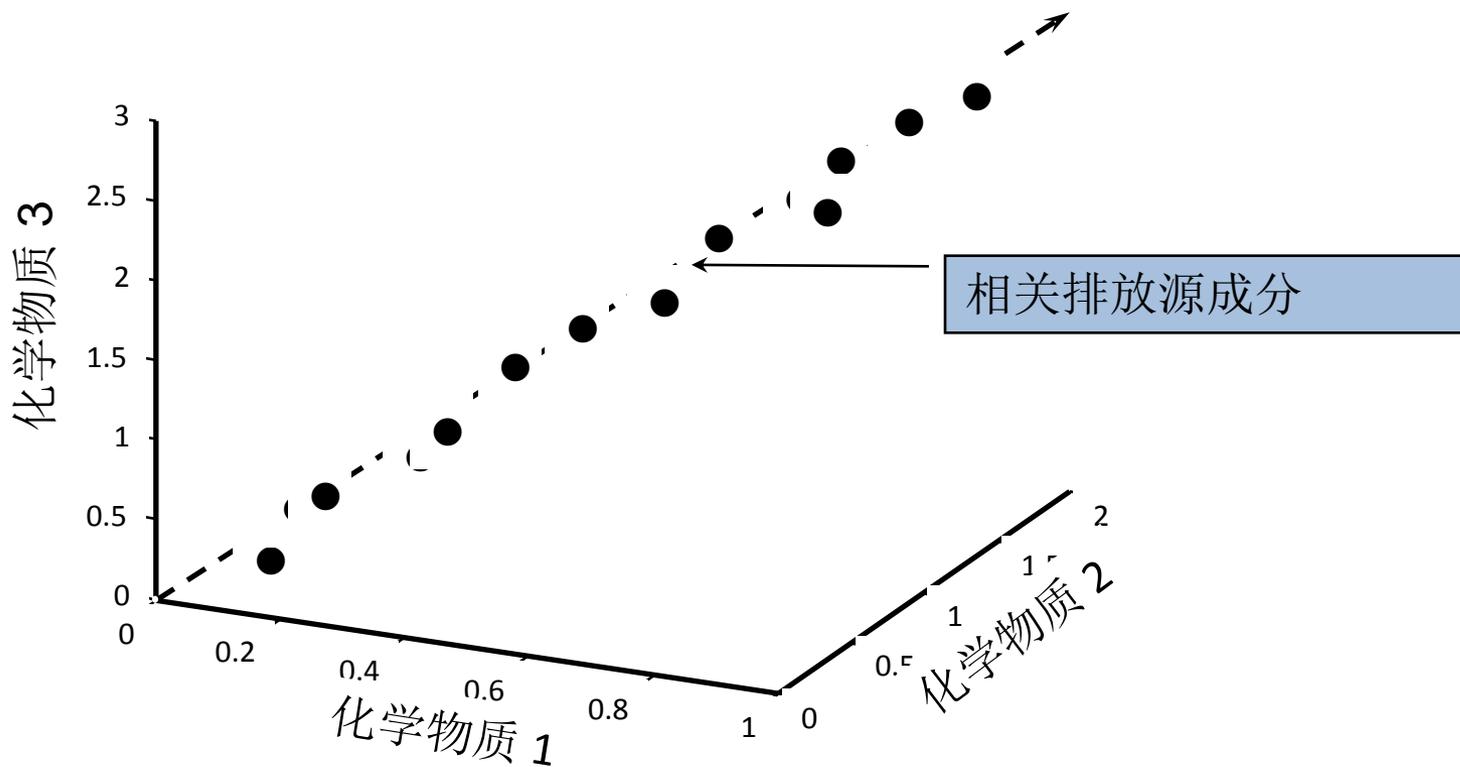




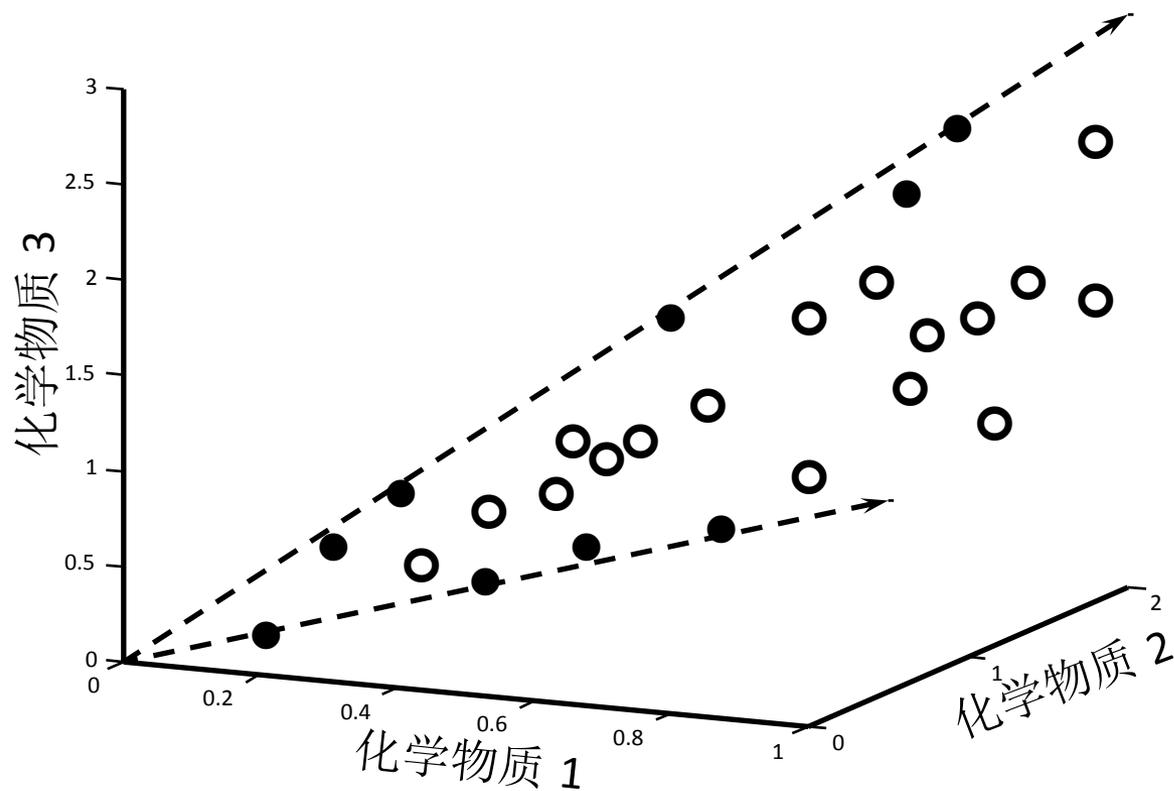
一个排放源



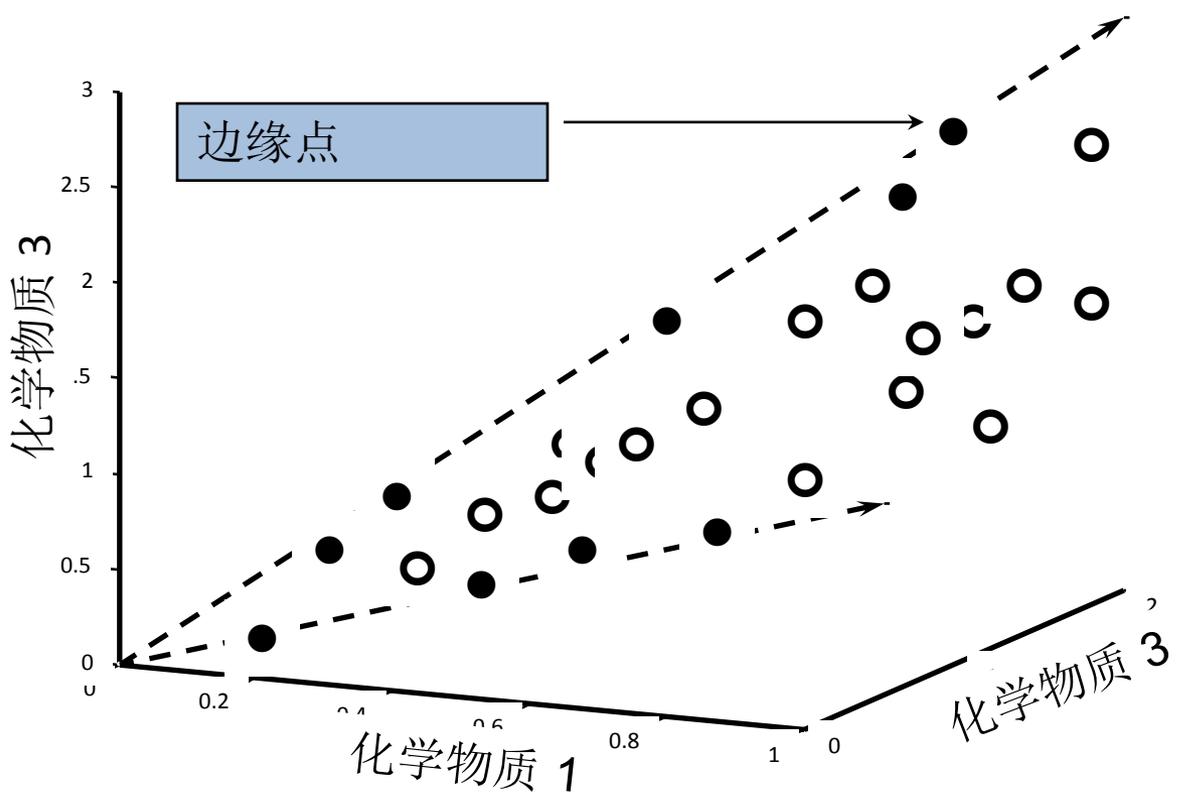
一个排放源——线性



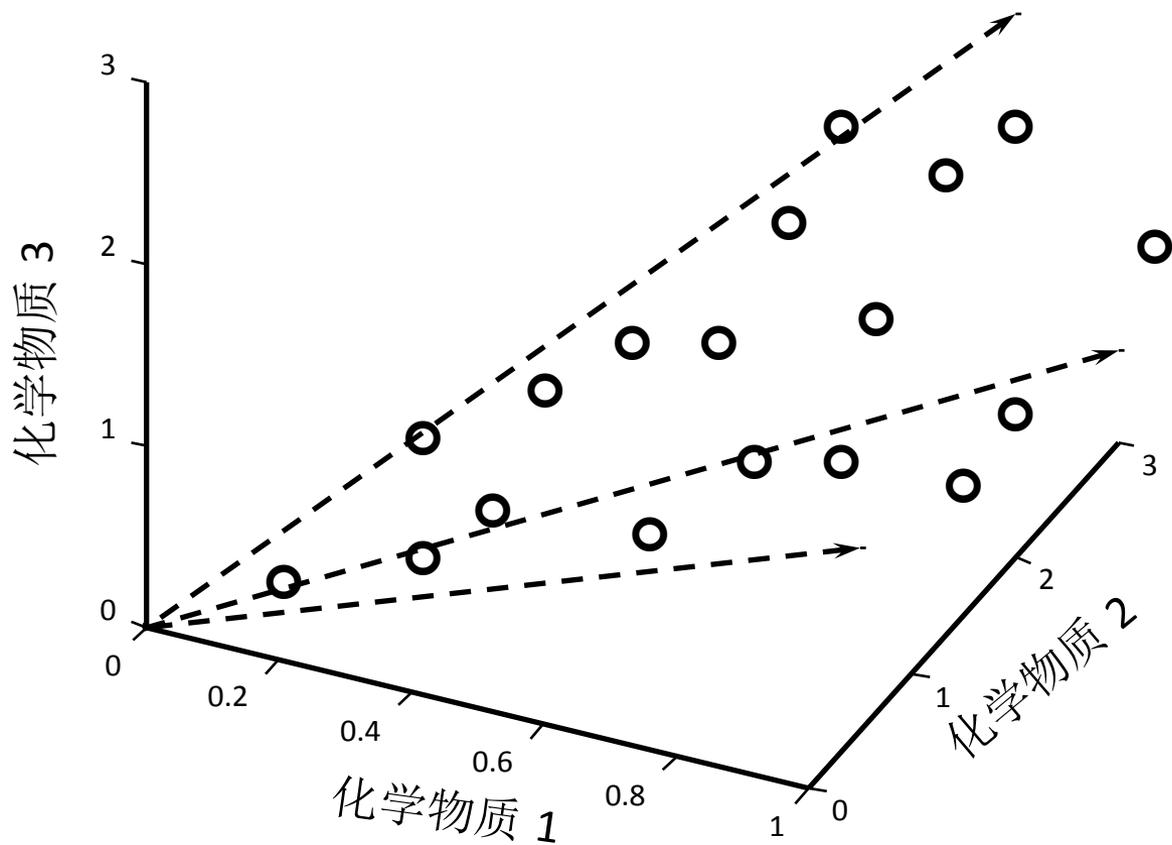
两个排放源



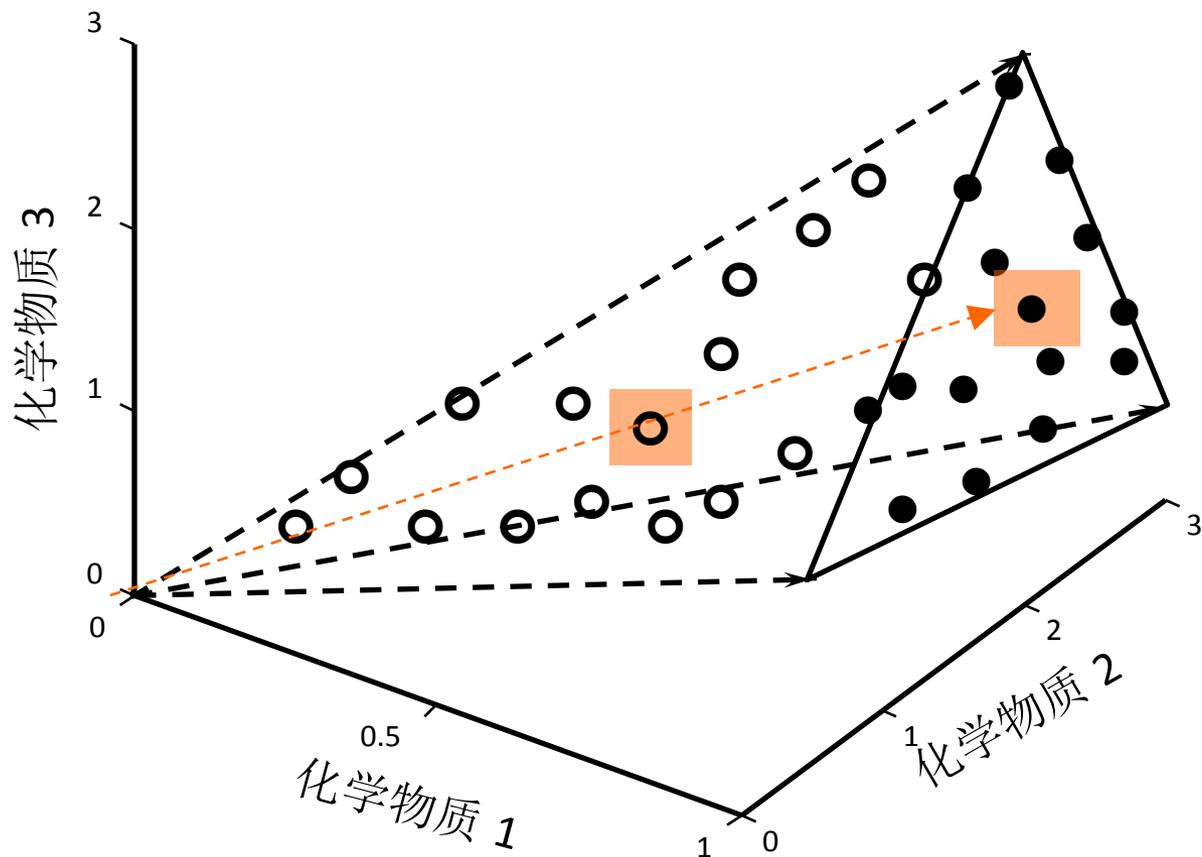
两个排放源——平面



三个排放源



投影到N-1维空间以获取 单向路线



假设

- 排放源成分保持近似恒定
- 至少有 $N^* (N-1)$ 个点不受 N 个排放源的影响或影响较小，即需要缺失一个排放源的一些点。

正矩阵因子分解

- 明确最小二乘方法来解决因子分析的问题
- 单个数据点的权重
- 施加自然和其他限制
- 灵活地构建更复杂的模型



正矩阵因子分解

- 目标函数Q被定义为:

$$Q = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left[\frac{x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj}}{\sigma_{ij}} \right]^2$$

其中 σ_{ij} 为 x_{ij} 不确定性的估计值



自然约束

- 必须遵守的最基本的自然物理约束：
 - 1) 原始数据必须由模型再现；模型必须能够解释观测结果。
 - 2) 预测排放源的成分必须为非负值；排放源的限制因子不能出现负百分比。

自然约束

- 3) 预测排放源对大气微粒的贡献必须为非负值；排放源不能释放负质量。
- 4) 各排放源的预测元素质量贡献的总和必须小于或等于各元素的总测量质量；整体应大于或等于各部分的总和。

非负约束

- 在PMF2中，非负性是通过将惩罚函数项纳入Q的定义中而施加的。
- 在EPA PMF中，图形用户界面（GUI）背后的解算程序是一个多线性发动机，通过NNLS来施加惩罚函数项（Lawson和Hanson）

稳健模式

- 这种稳健的因子分解模式是基于Huber影响函数[Huber, 1981]而创建的，这种函数可以对单个数据值进行迭代复秤。因此，最小二乘法变为：

$$Q = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (e_{ij} / h_{ij} s_{ij})^2$$

稳健模式

$$h_{ij}^2 = \begin{cases} 1 & \text{if } |e_{ij} / s_{ij}| \leq \alpha, \text{ and} \\ |e_{ij} / s_{ij}| / \alpha & \text{otherwise} \end{cases}$$

其中， α = 孤立点的距离，通常 $\alpha = 4.0$ 。当分析环境数据时，通常建议使用稳健模式。

发展中的不确定性

- 测量值
- 低于检测限制的值
- 漏失值

请参见 Polissar等人观察的阿拉斯加上空的大气颗粒。
2. 元素组成和来源, *J. Geophys. Res.* 103: 19,045-19,057 (1998)。

测量值

- 就确定值而言，

$$x_{ij} = v_{ij}$$

其中， v_{ij} 是指测量值

- 预测的不确定性为：

$$s_{ij} = u_{ij} + d_{ij} / 3$$

其中， u_{ij} 是指测量不确定性， d_{ij} 是指方法检测限值。

BDL值

- 就BDL值而言，

$$x_{ij} = d_{ij} / 2$$

其中， d_{ij} 是指方法检测限值

- 预测的不确定性为：

$$s_{ij} = d_{ij} / 2 + d_{ij} / 3$$

漏失值

- 就漏失值而言，

$$x_{ij} = \bar{v}_{ij}$$

其中， v_{ij} 是指几何平均值。

- 预测的不确定性为：

$$s_{ij} = 4\bar{v}_{ij}$$

信噪比

- 对于一个变量来说，我们通过数据集来计算S/N的平均值

$$\frac{S}{N} = \sqrt{\frac{\sum s_i^2}{\sum n_i^2}}$$

Weak和Bad 变量

- 在“*weak*变量”中，信号和噪音大致相当

$$0.2 < \frac{S}{N} < 2.0$$

- 在“*bad*变量”中，噪音要比信号多得多

$$\frac{S}{N} < 0.2$$

Weak和Bad 变量

- 我们很难精确地定义weak和bad变量。
- 一方面，就建议技术来说，目前我们的实践经验仍非常有限。
- 在实际的数据分析中，经证明这些“经验法则”非常有用。

因子数估计

Q的理论值应约等于自由度数，或者约等于数据阵列中的数据点的总数。如果对误差进行正确的估计，则可以看出，通过各个数据点的拟合，再现值与估计误差值之比大约等于1与Q值之比。

因子数估计

- 目标函数Q被定义为

$$Q = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left[\frac{x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj}}{s_{ij}} \right]^2$$

其中， s_{ij} 为 x_{ij} 不确定性的估计值

因子数估计

- 因此，我们可以大胆地将 Q 值作为一个因子数函数来确定要保留的因子数。
- 然而，如果未能确定好数据点的不确定性，这种方法可能会产生误导。
- 当所测量的不确定性被用作权重时，我们就已经对这一问题进行了测量。

因子数估计

- 需要关注 Q 的变化值，因为由于纳入适当数量的因素后，还需计算附加因素的影响，附加因素不会导致 Q 值出现进一步的改善。
- 然而，就所需的因子数来说并没有一个明确的规定。

因子数估计

- 另一套有效的指标是按比例缩小的残值。即

$$\frac{e_{ij}}{s_{ij}} = \frac{x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj}}{s_{ij}}$$

因子数估计

- 这些残值应对称分布，范围为-3至3，而且值越小越好。
- 如果出现巨大的偏差，则表明，拟合不正确，并应寻找其他解决方案。

因子数估计

- 一般归结为数据分析员就派生因子是否合理而做出的判断。

旋转

- 提供有以下几种旋转方法
 - FPEAK
 - FKEY
 - G空间图解
- FKEY需要对ME编程语言有一个更深入的理解，此处不作进一步讨论。

旋转

- 从某种程度上来说，FPEAK的作用类似于方差极大旋转。它试图通过一个或另一个矩阵中的矢量来实现高值和低值。
- FPEAK如果为负值，G中的矢量就会出现高值和低值。
- FPEAK如果为正值，F中的矢量就会出现高值和低值。

旋转

- 一般情况下，根据我们的经验，如果 $FPEAK < 0$ ， $FPEAK$ 就会成为一个良好的解决方案。
- 然而，在某些情况中， $FPEAK$ 负值也会产生最好的结果。

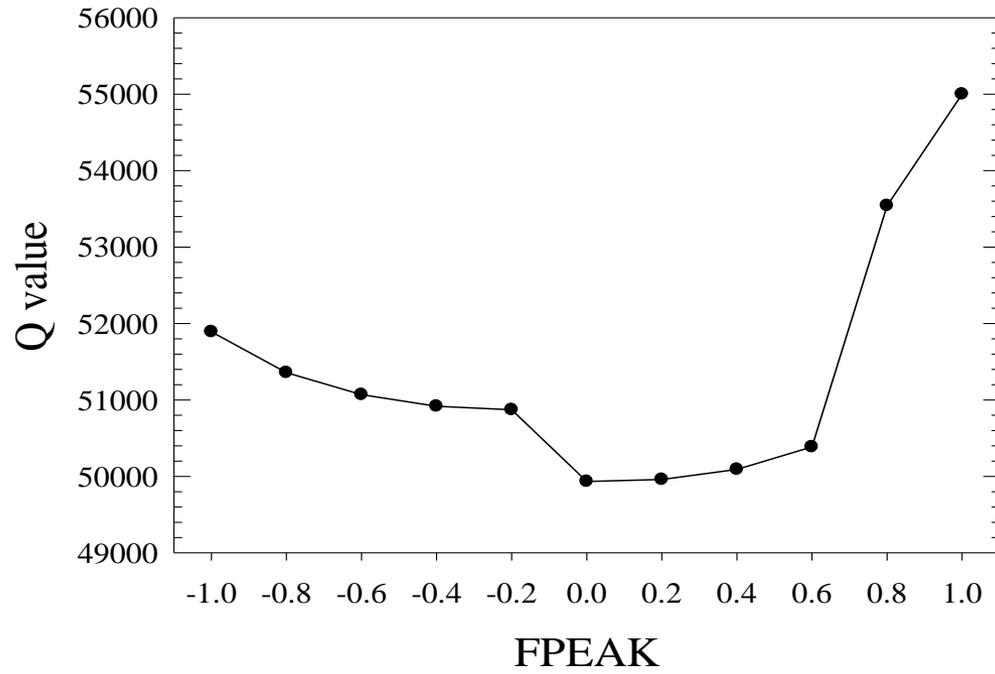
旋转

- FPEAK的变化范围如何？
- 仅仅凭借一套简单的规则是不能确定出一种“正确”的解决方案的。

旋转

- 一个有用的方法是逐步实现一系列FPEAK值。不管之前我们曾说过什么，我们通常会看到，当步骤为0.1或0.2时，FPEAK的值一般为-0.4至+0.8不等，我们将Q视为FPEAK的函数。

旋转



旋转

同样，在FPEAK的选择方面，我们并没有一个明确的指导方针。

从数学意义上来说，在“足够好的”Q范围内的任何值都是可以接受的。

因此，这取决于分析员对各因素质量的判断。

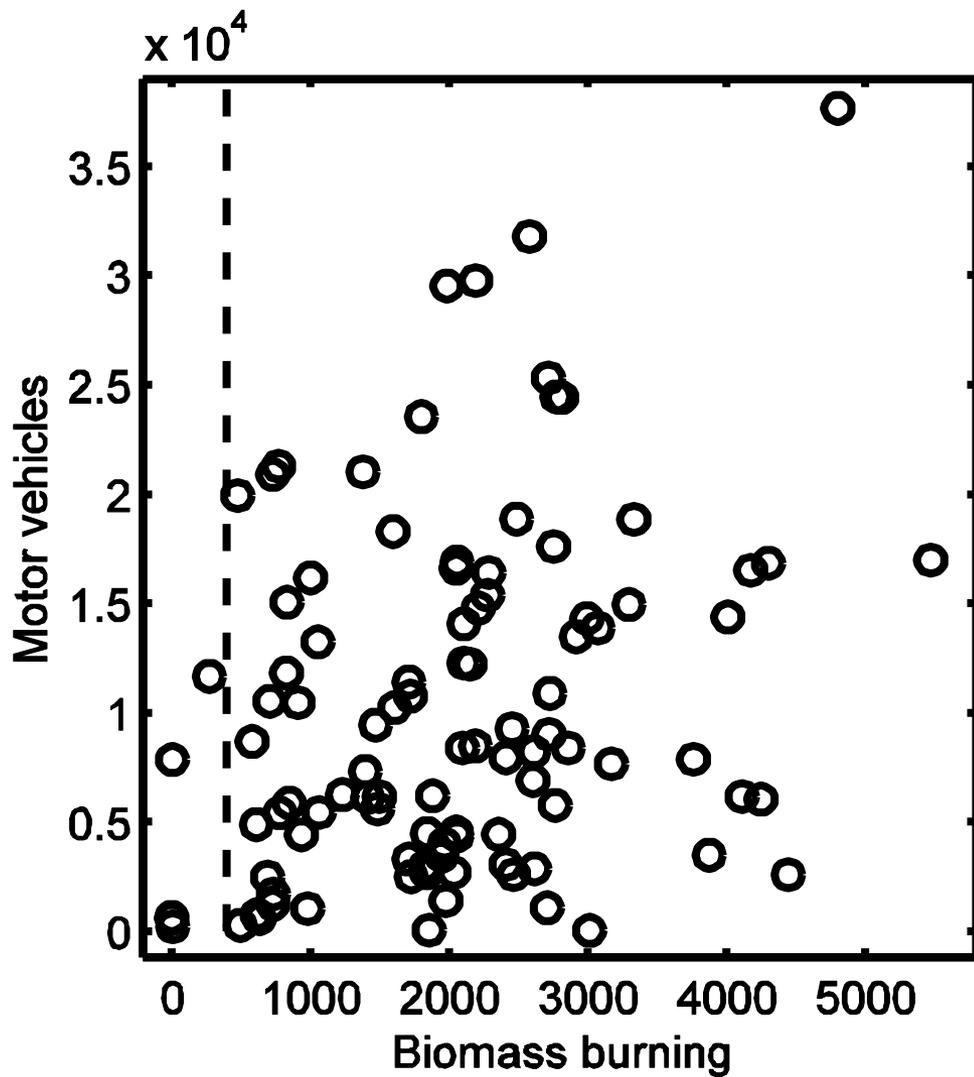
G空间边缘

- 用来评估旋转需求的方法就是来观看成对的因子g值的散点图。

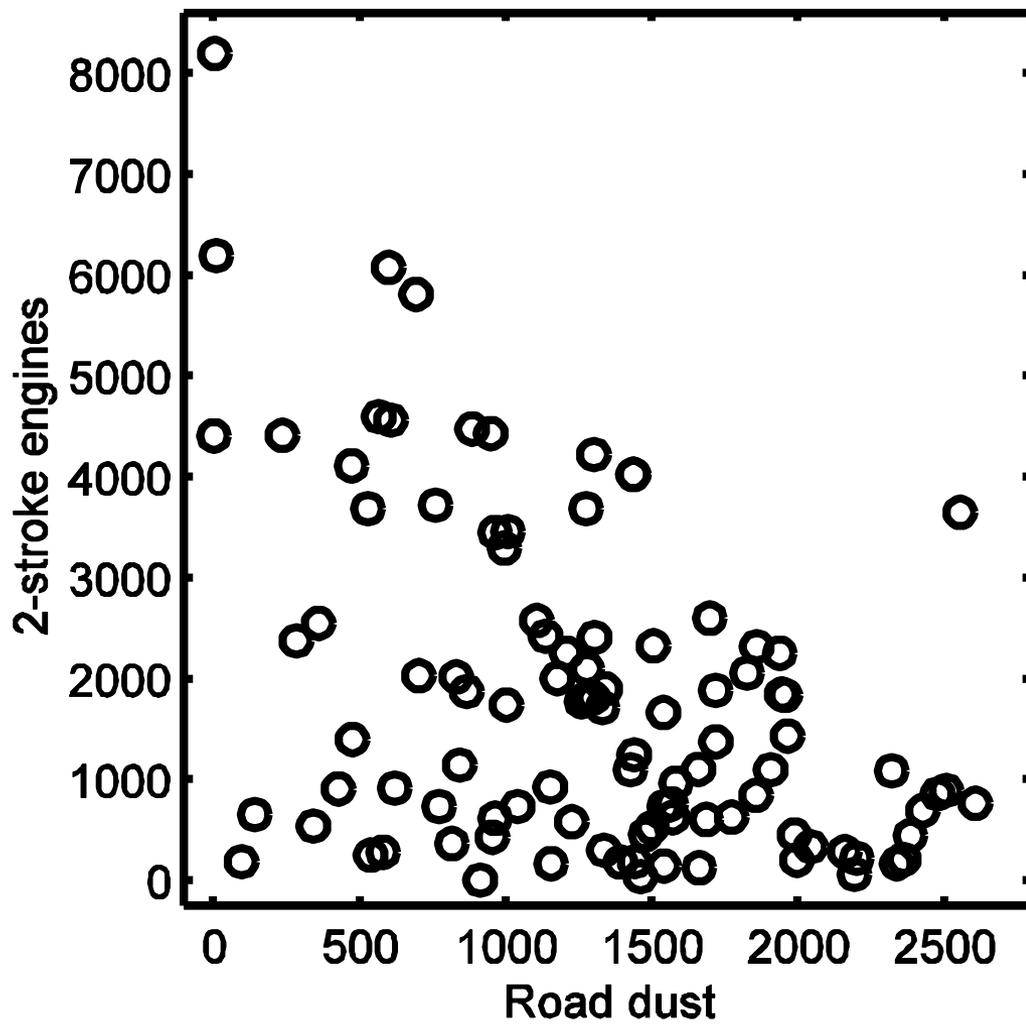
G空间边缘

- 如果这两个因素是相互独立的，那么所得到的贡献值应该完全填充散点图，而且它们之间应该没有相关性。

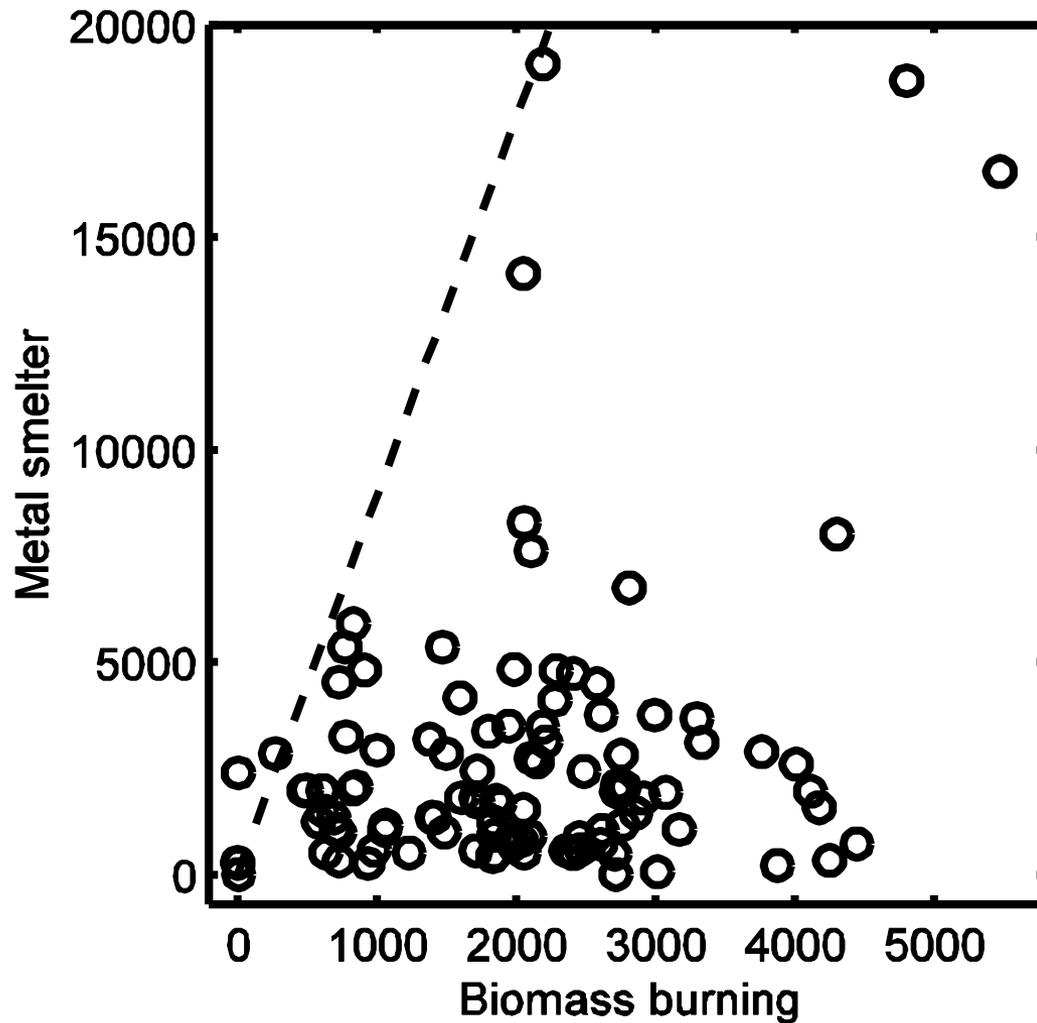
G空间边缘



G空间边缘



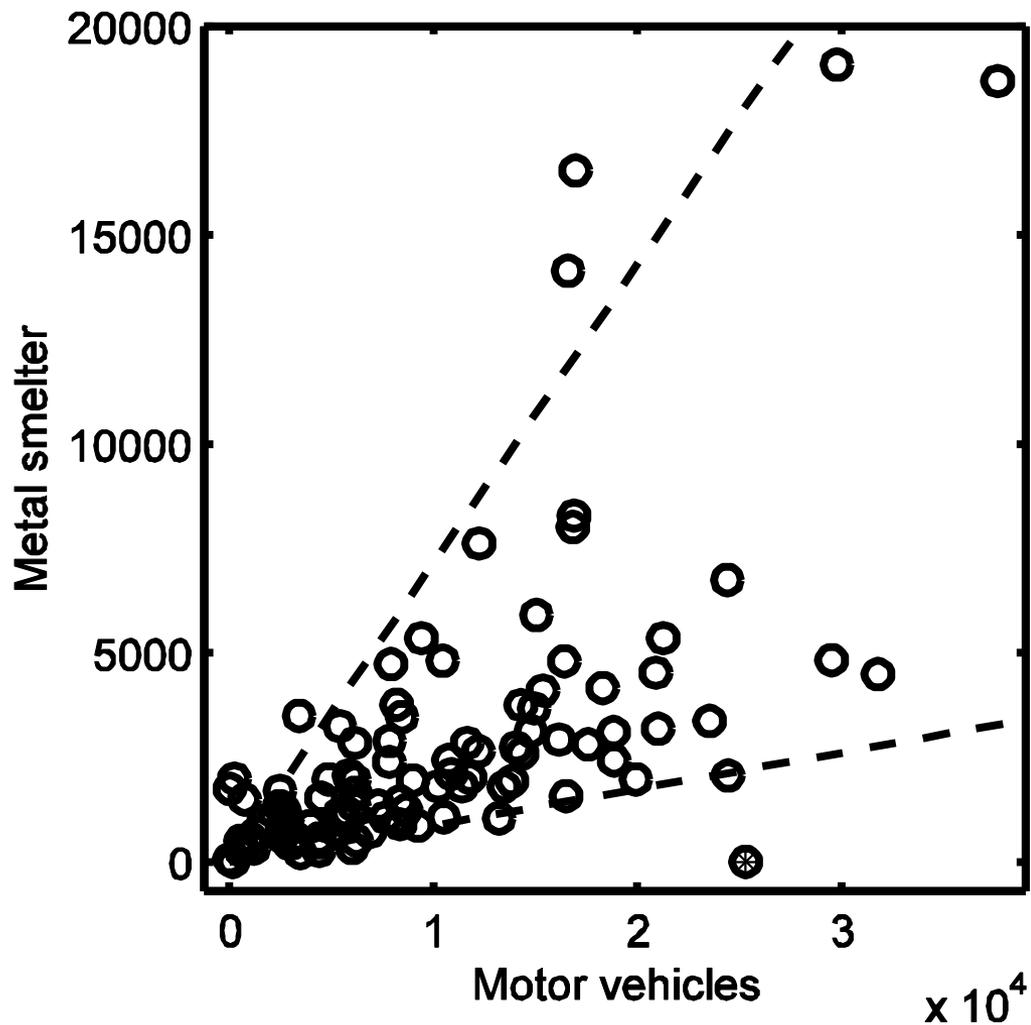
G空间边缘



G空间边缘

- 显然，这个散点图会有边缘。
- 如果这两个因素相互关联，会有什么影响吗？
- 如果无相关性，则表明需要进行旋转。

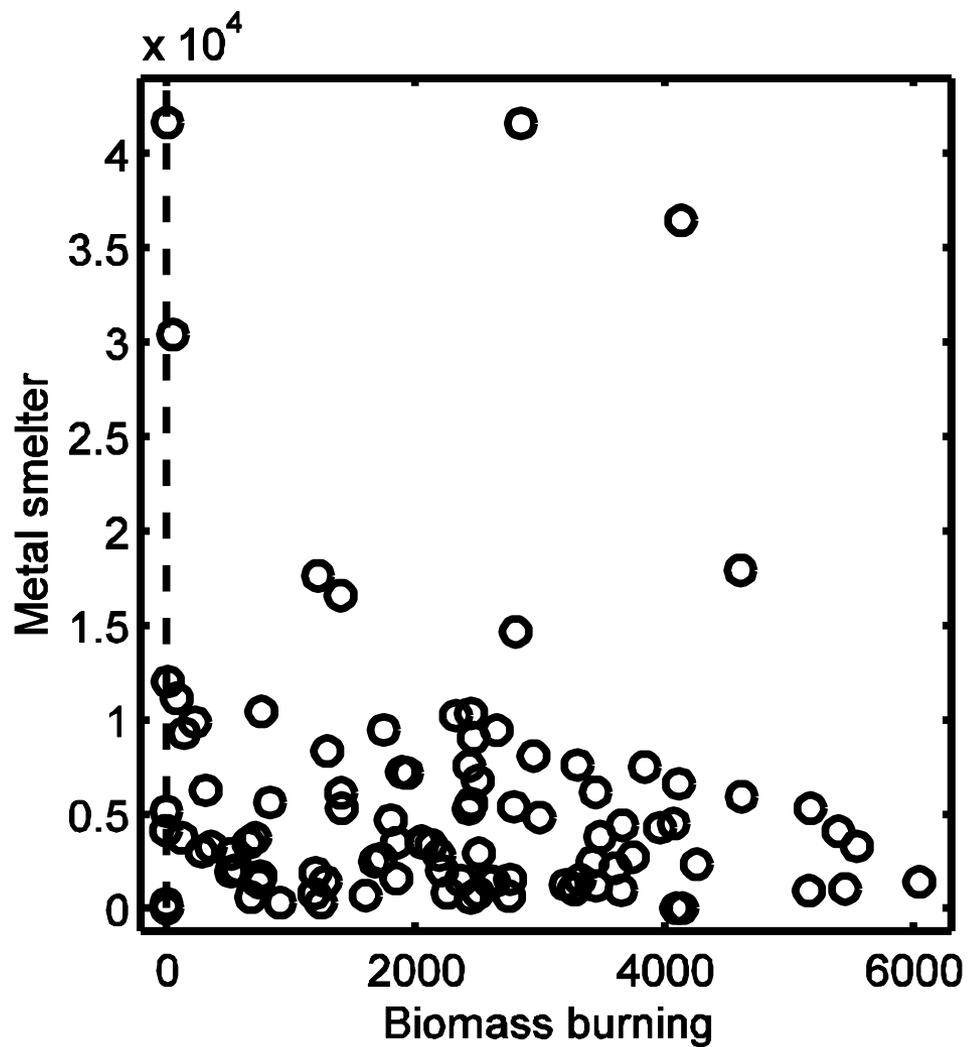
G空间边缘



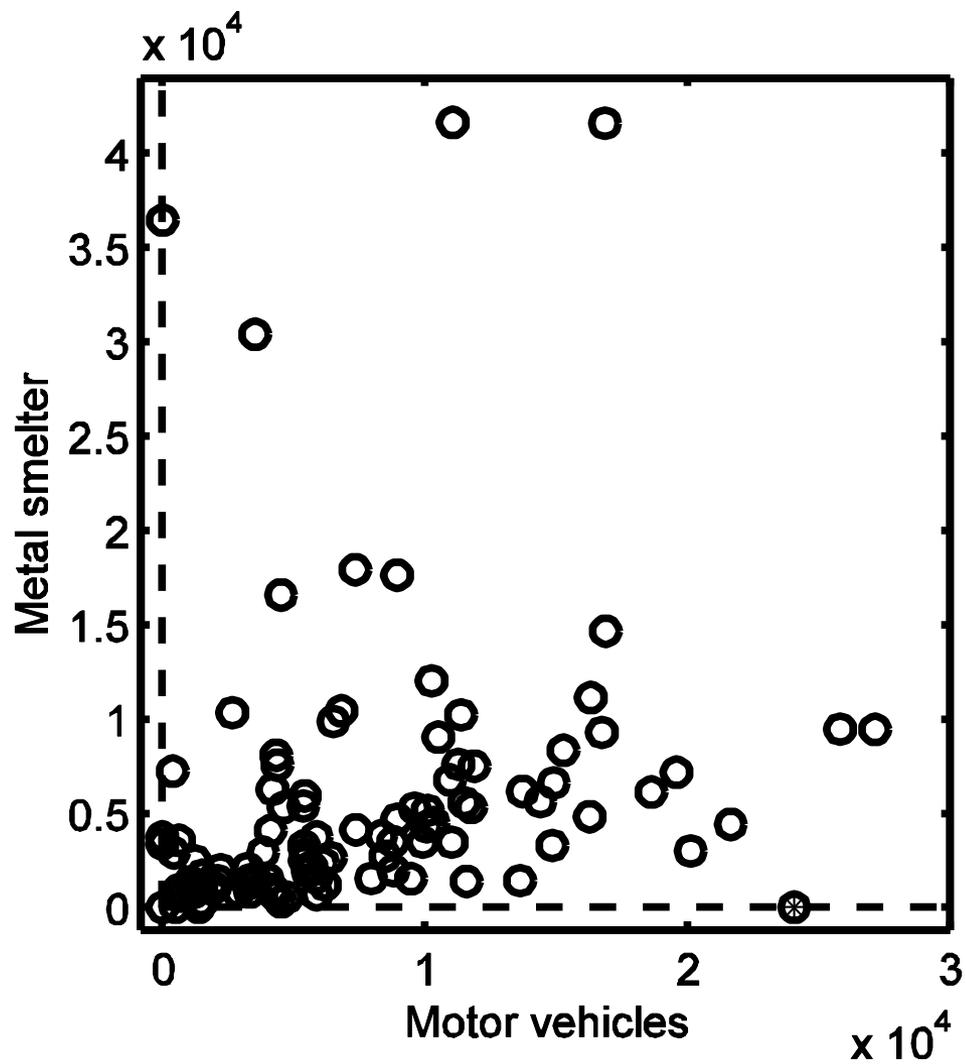
G空间边缘

- 注意，显性边缘之外会出现点。
- 应对这些点进行检查，以确保这些点的归属。然而，必要时，也可以忽略它们。

G空间边缘



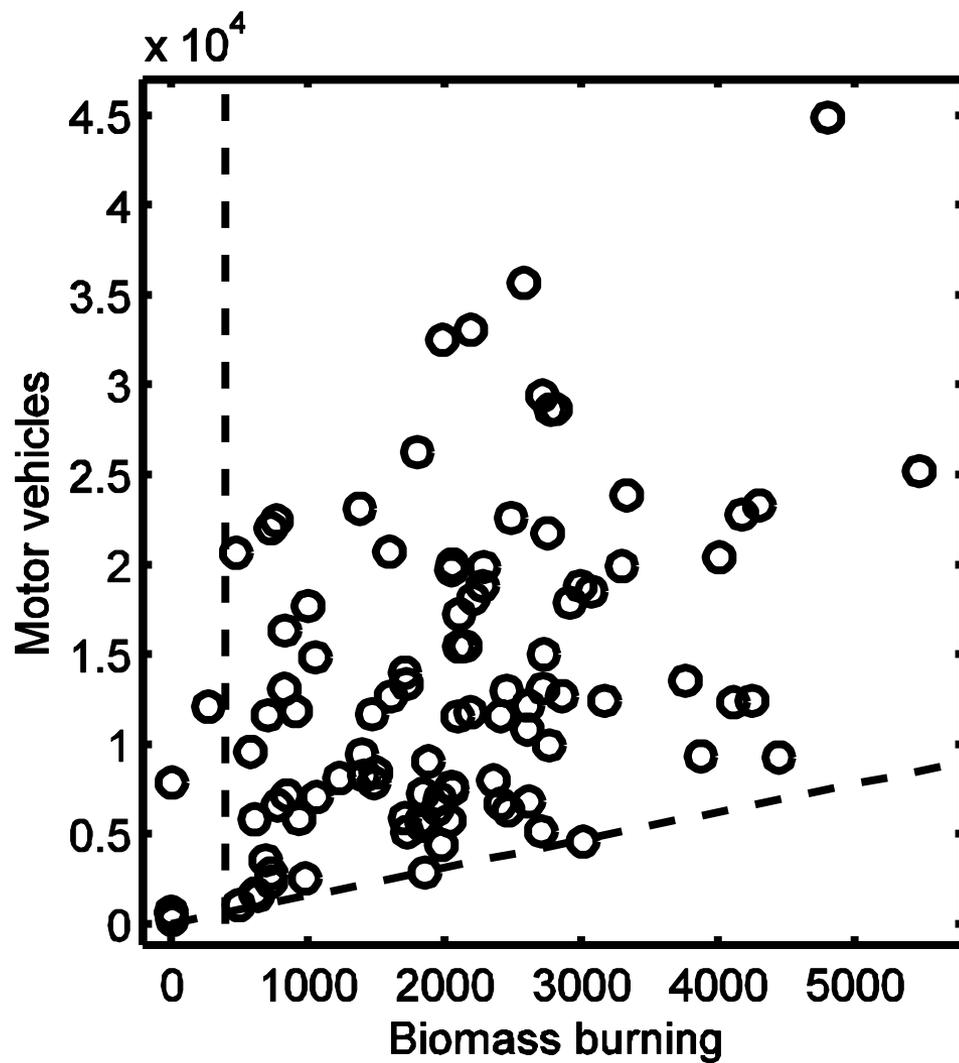
G空间边缘



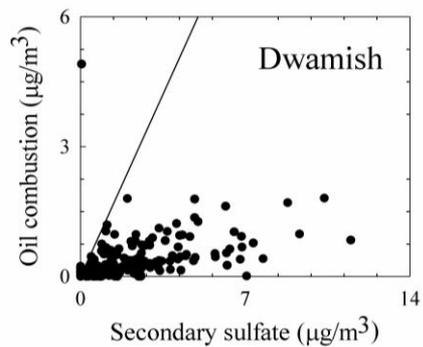
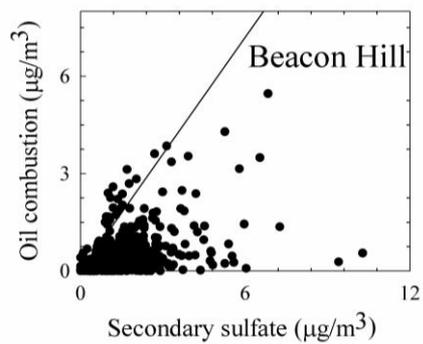
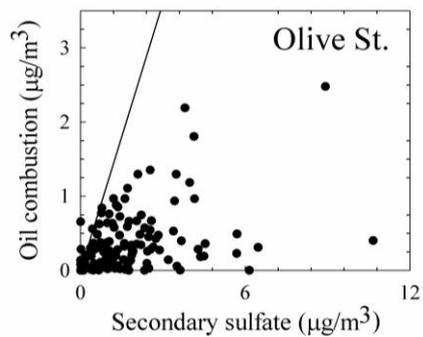
G空间边缘

- 即使经过旋转，边缘可能仍不会消失。

G空间边缘



G空间边缘



质量解析

- 在进行质量解析时，我们可以用到以下两种方法：
 - 质量值的回归，或
 - 将质量值纳入PMF分析中

质量解析

- 就回归方法而言，假设我们已经确定了能够进行质量解析的所有因素，而不仅仅是只用到了—些可用的因素。
- 如果是这样的话，那么 g_{ik} 值的总和应等于所测量的质量浓度。

质量解析

- 然而，它们的比例因子不同

$$X_{ij} = \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj} = \sum_{k=1}^p g_{ik} S_k \frac{f_{kj}}{S_k} = \sum_{k=1}^p g'_{ik} f'_{kj}$$

质量解析

- 在EPA-PMF中，PMF分析通过直接将测得的PM质量作为一个变量纳入分析中来进行质量分析，但会出现极大的误差（低权重），如4 *质量值。
- 那么质量则不会直接拟合，但是与被测物质相关的质量将会被分摊。

质量解析

- 分摊PM质量除以成分谱中的f值。
- g值乘以相同的PM质量值。
- 在EPA PMF中，当您将PM质量作为“总变量”时，这一过程是自动进行的。



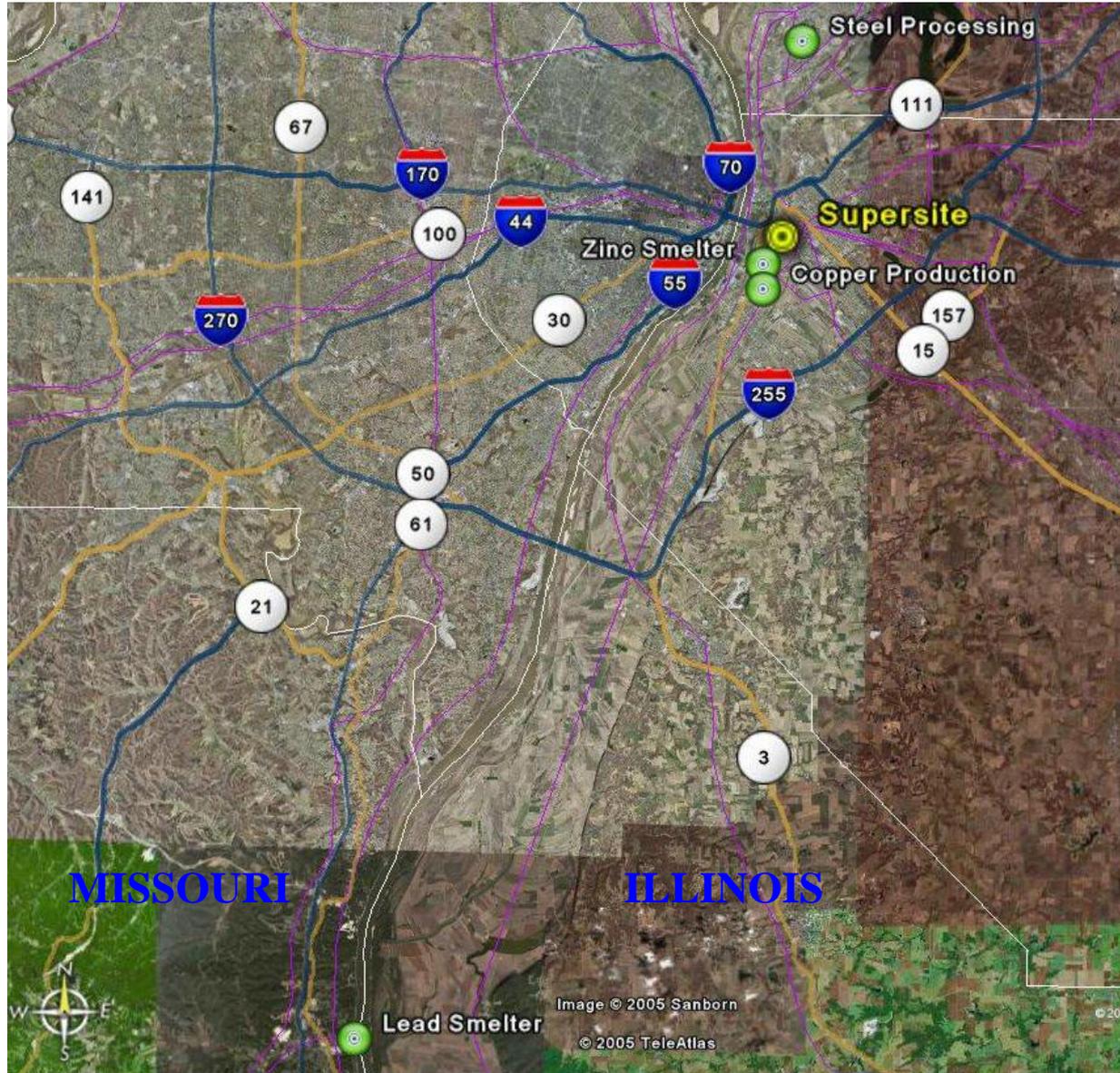
正矩阵因子分解

- 密苏里州圣路易斯市就是一个很好的例子，其日常数据是通过2年的时间观测到的，而且还有几个确定好的点源。
- J.H. Lee, P.K. Hopke, J.R. Turner, J. Geophys. Res. 111, D10S10 (2006)描述的结果。
- 铅冶炼厂在某种程度上对这种结果进行了验证。

实验

- 对每日24小时的综合PM2.5质量和成分进行测定
- 从2001年6月至2003年5月时长两年的数据
- HI - 质量（重量）、元素（XRF）
- HEADS - 离子（IC）
- 美国威斯康星低流量采样器
 - OC, EC（IMPROVE / TOR协议）

现场位置

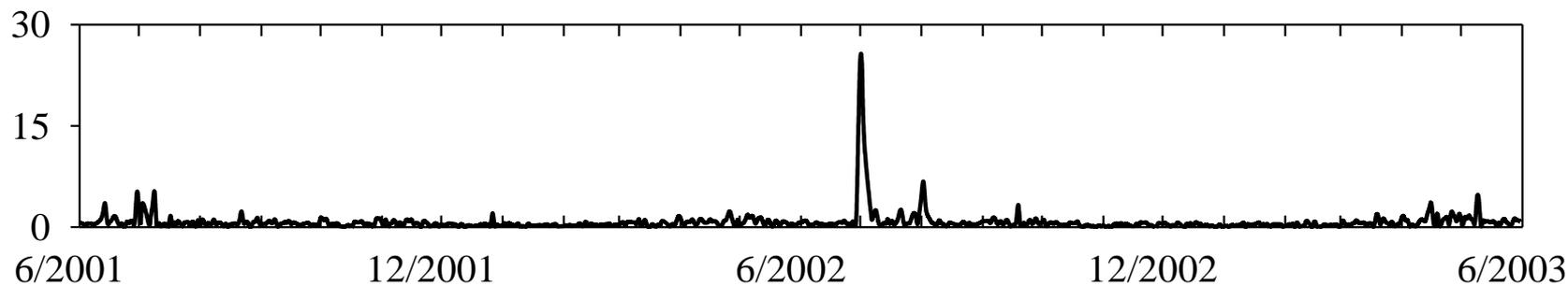
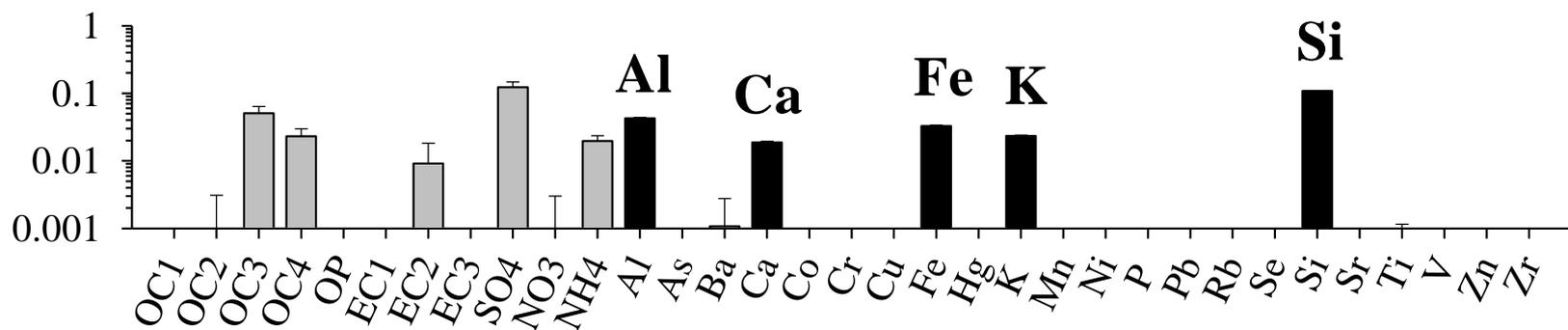


排放源总结

- 从PMF和CPF确定了10处排放源：
- 二次硫酸盐，二次硝酸盐
- 富含碳的硫酸盐
- 汽车尾气，柴油/铁路
- 经空气传播的土壤（包括撒哈拉尘土）
- 钢材加工、锌冶炼、铅冶炼、铜生产



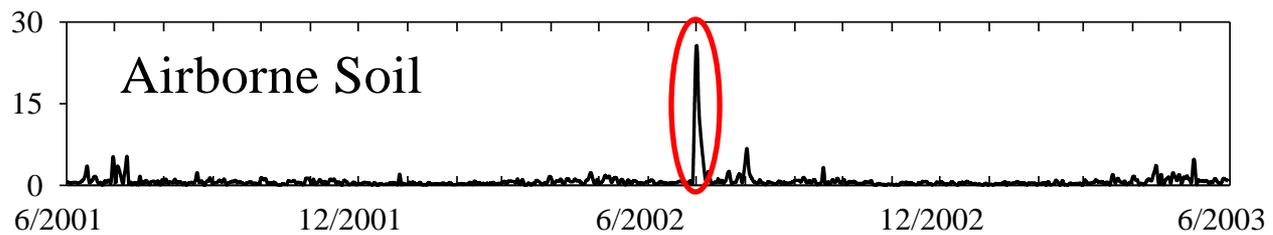
经空气传播的土壤



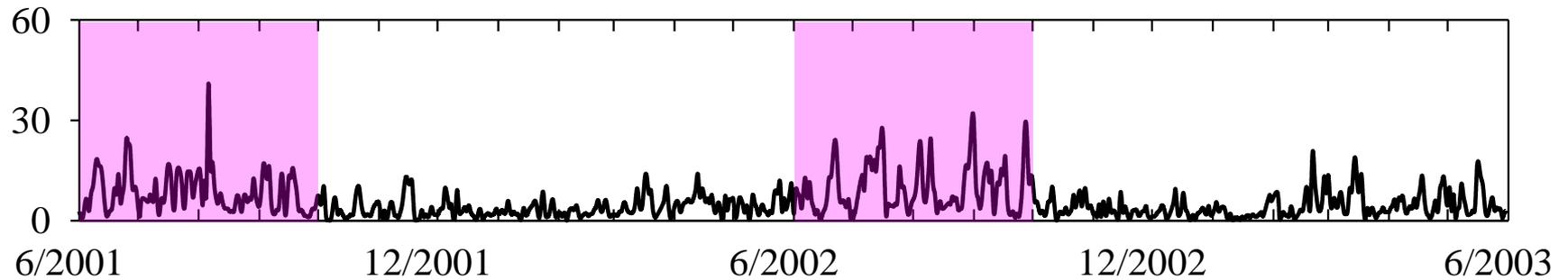
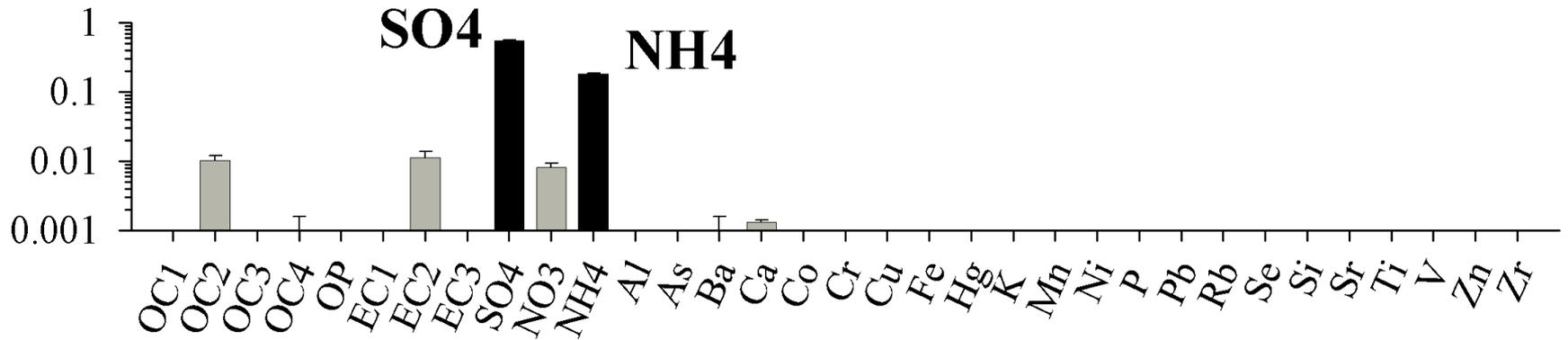
NOAA HYSPLIT MODEL
Backward trajectory ending at 18 UTC 01 Jul 02
CDC1 Meteorological Data



Source ★ at 38.61 N 90.16 W



二次硫酸盐



潜在排放源的贡献函数

- 如果traj.端点位于第*ij*个细胞中，气块会收集从细胞中释放的PM并沿traj.传输至监测点
- $PSCF_{ij}$ 是穿过第*ij*个细胞抵达监测点的气块的高浓度的条件概率

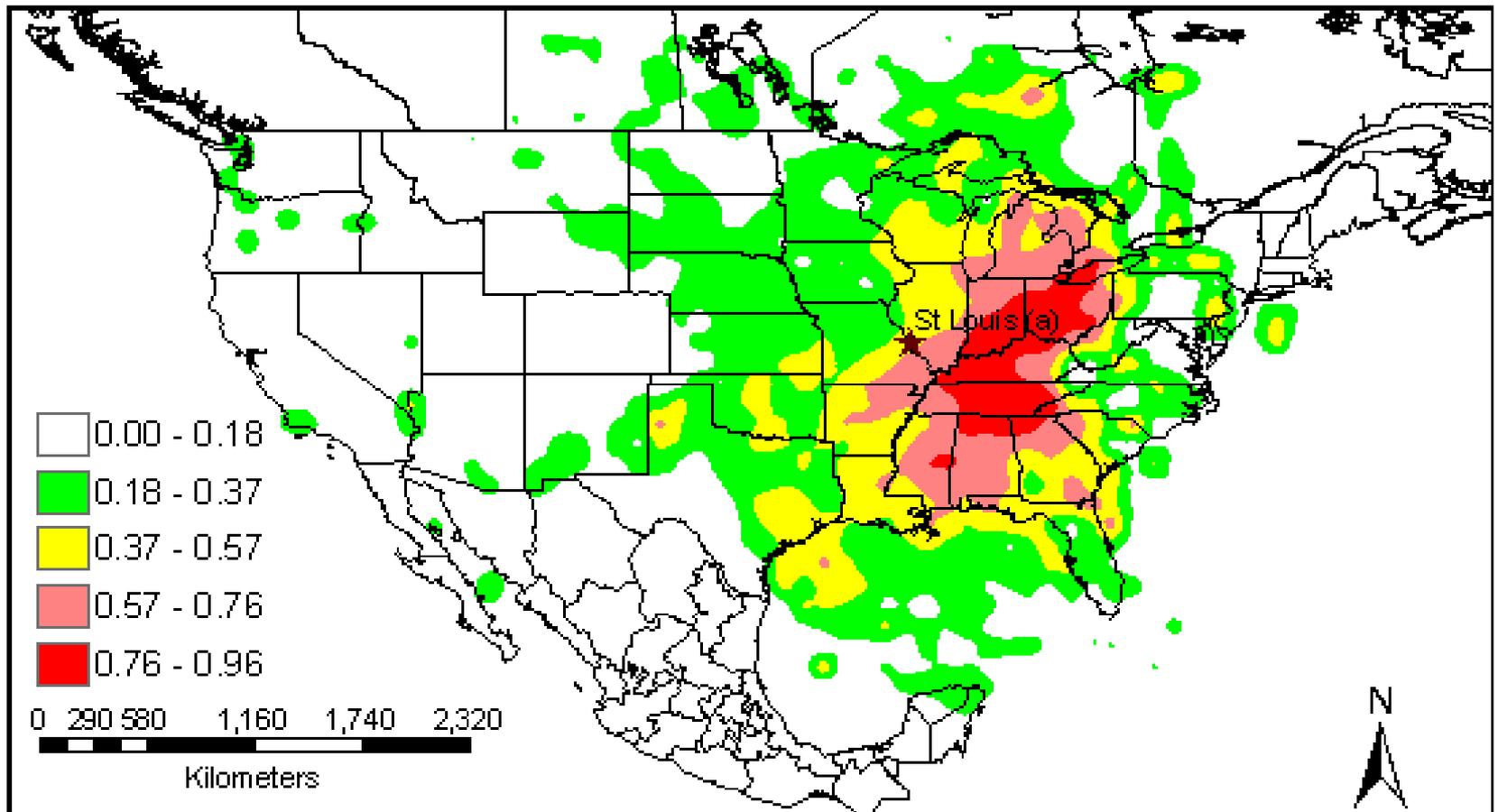
$$PSCF_{ij} = \frac{m_{ij}}{n_{ij}}$$

n_{ij} : 进入第*ij*个细胞的端点的总数

m_{ij} : 超出限制标准的端点数

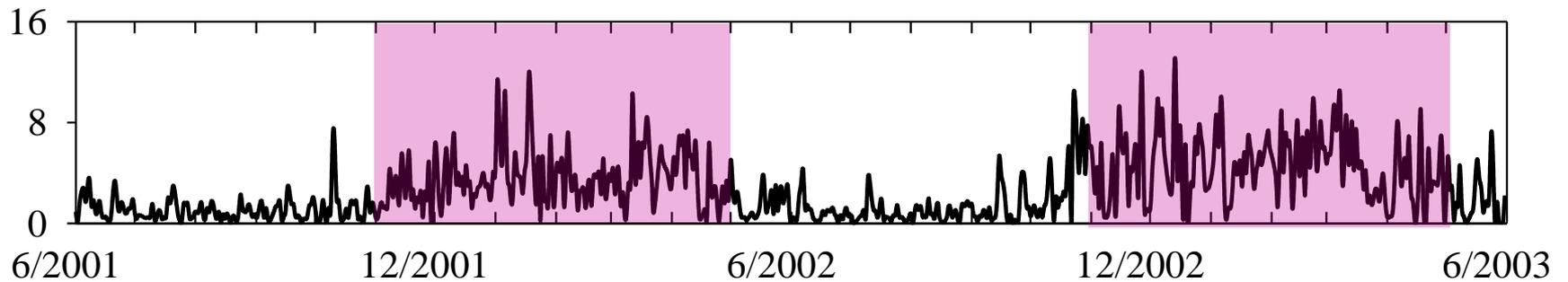
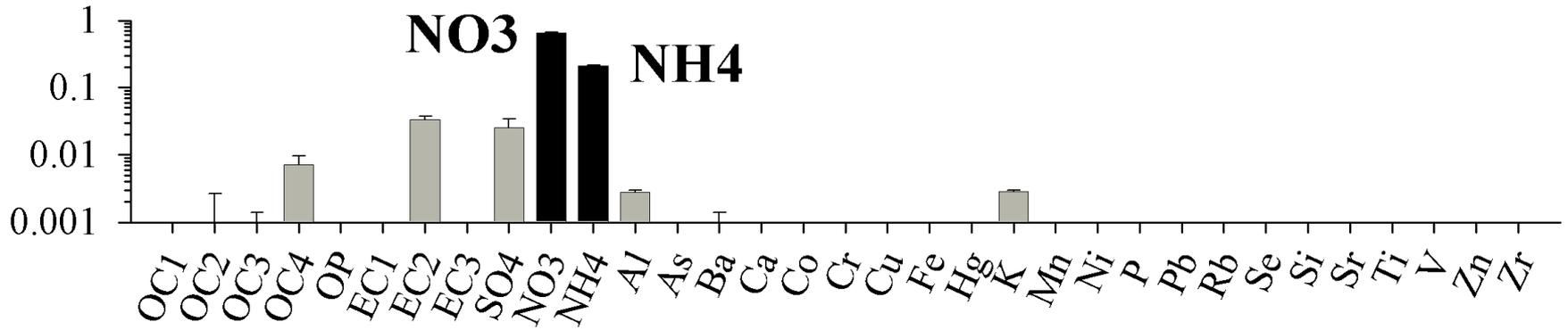
(在本研究中，各物质的平均浓度为限制标准)

二次硫酸盐

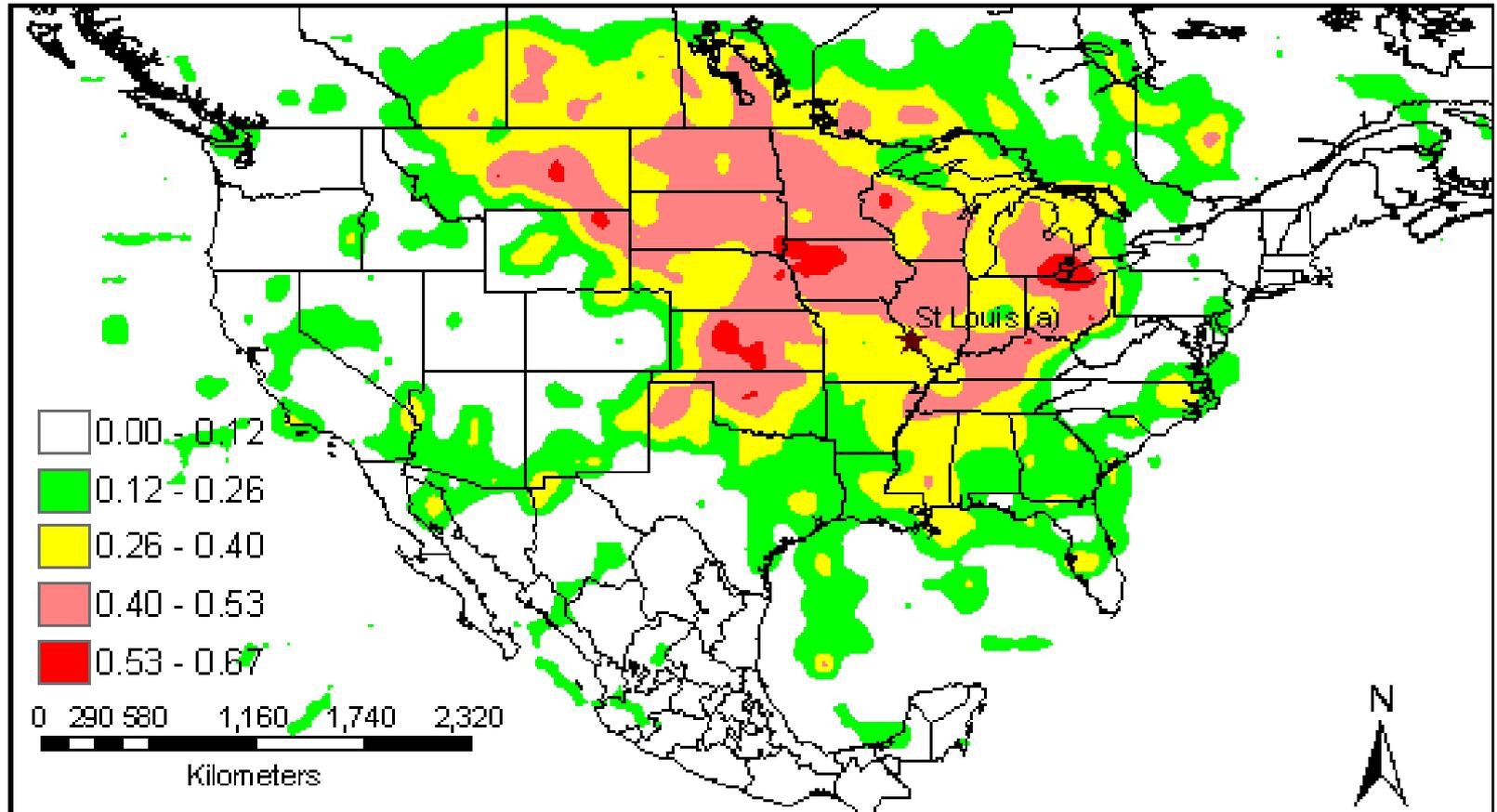


对Lee等人(2005) 2005年AAAR超级站会议信息的改编

二次硝酸盐

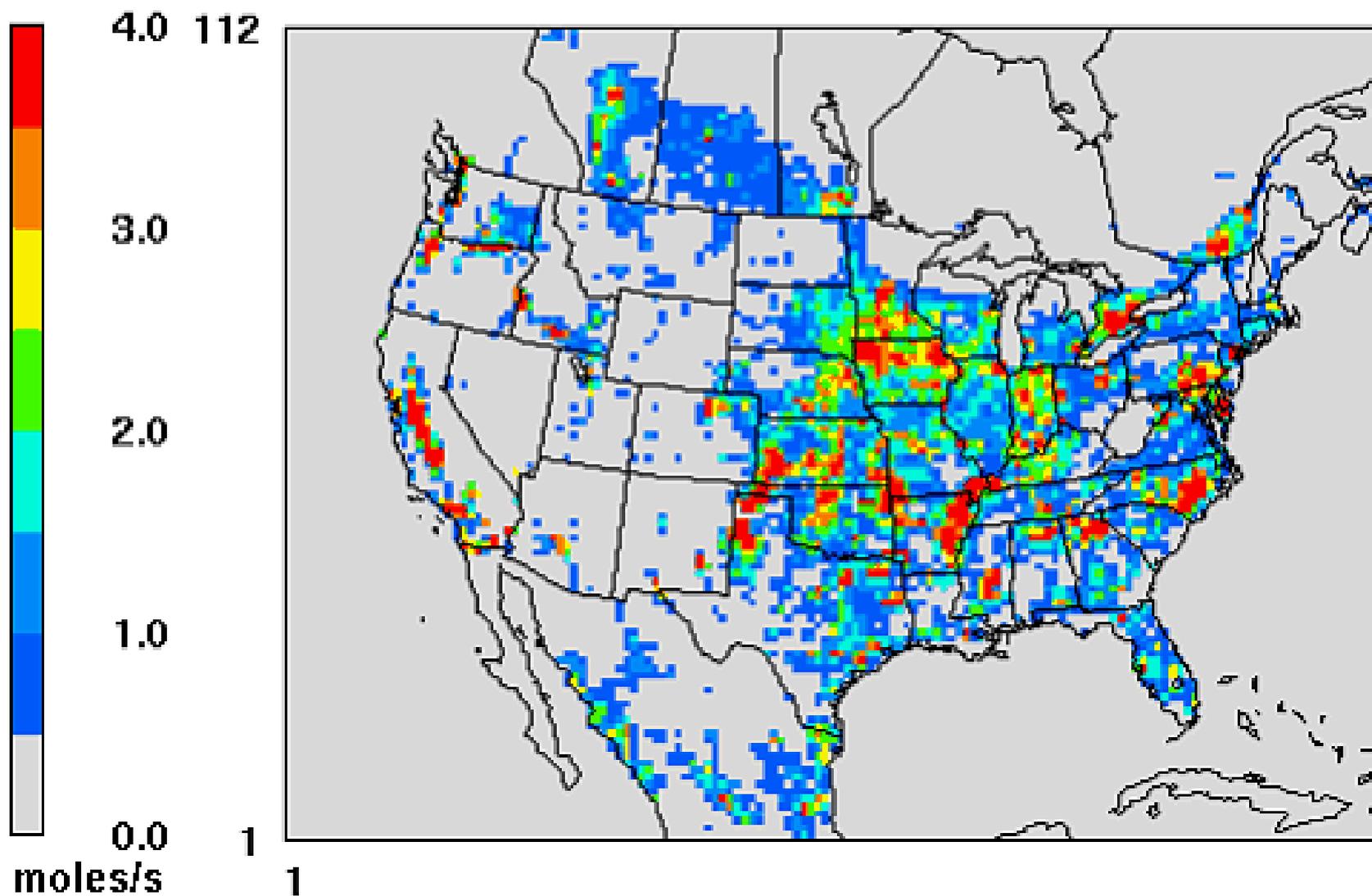


二次硝酸盐

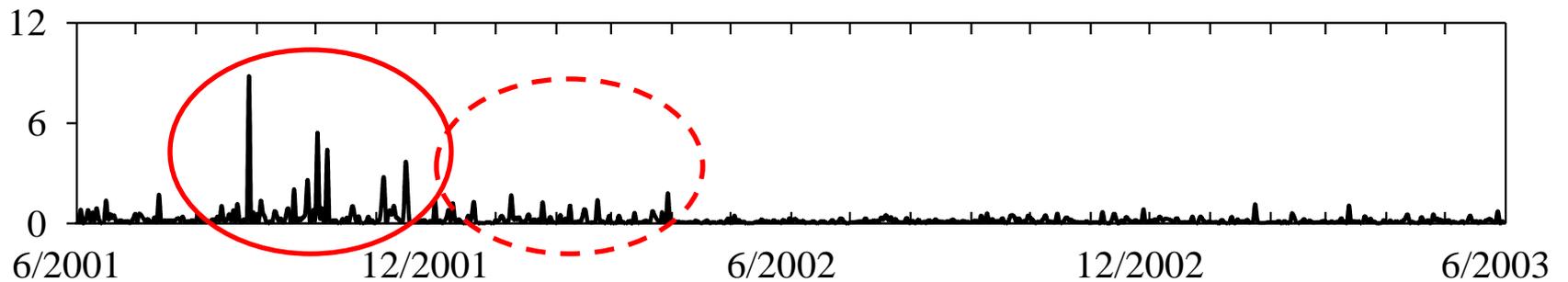
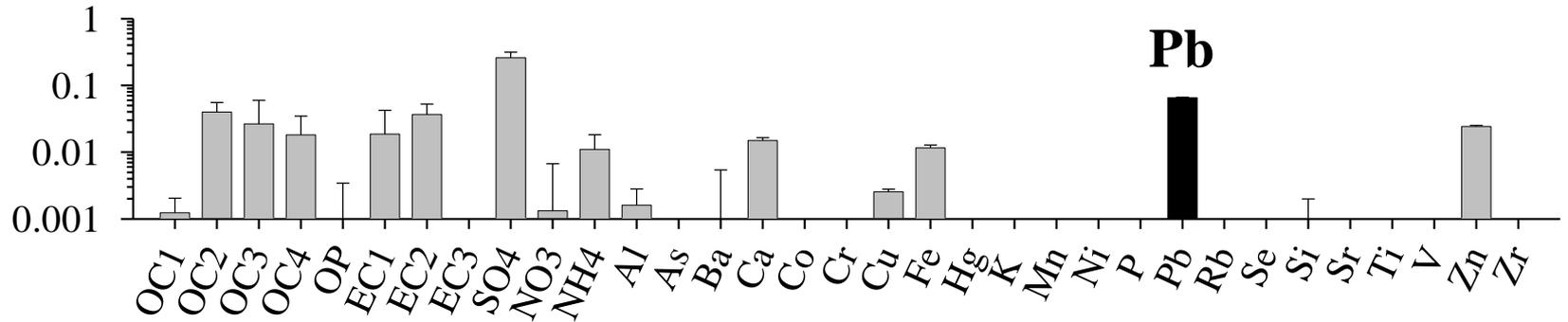


对Lee等人(2005) 2005年AAAR超级站会议信息的改编。

氨水排放位置



铅冶炼



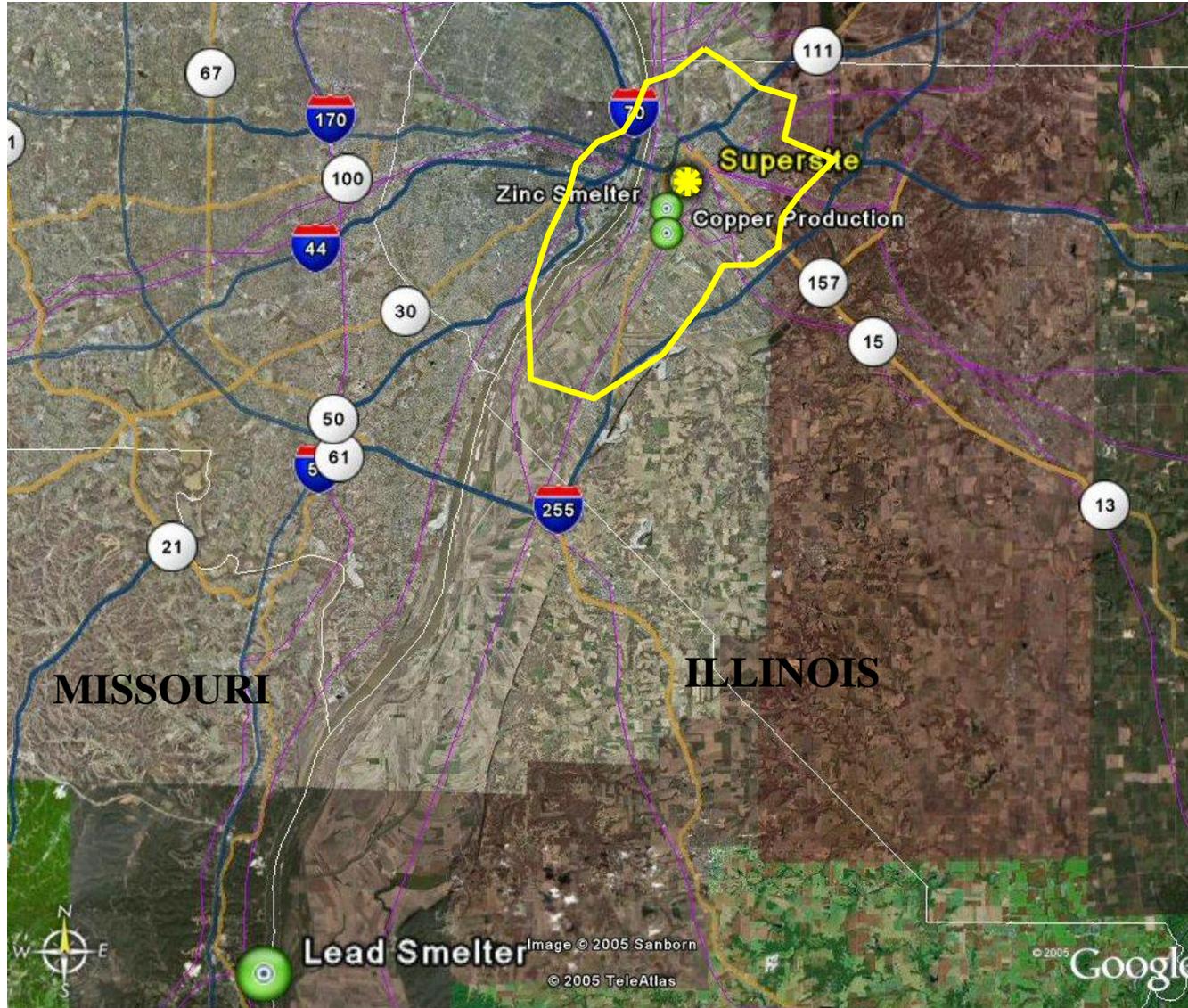
条件概率函数

$$\text{CPF} = m_{\Delta\Theta} / n_{\Delta\Theta}$$

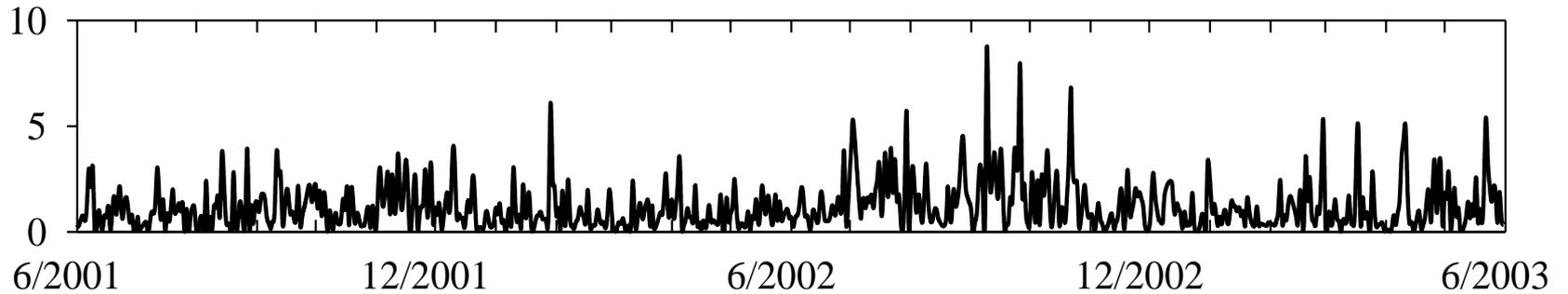
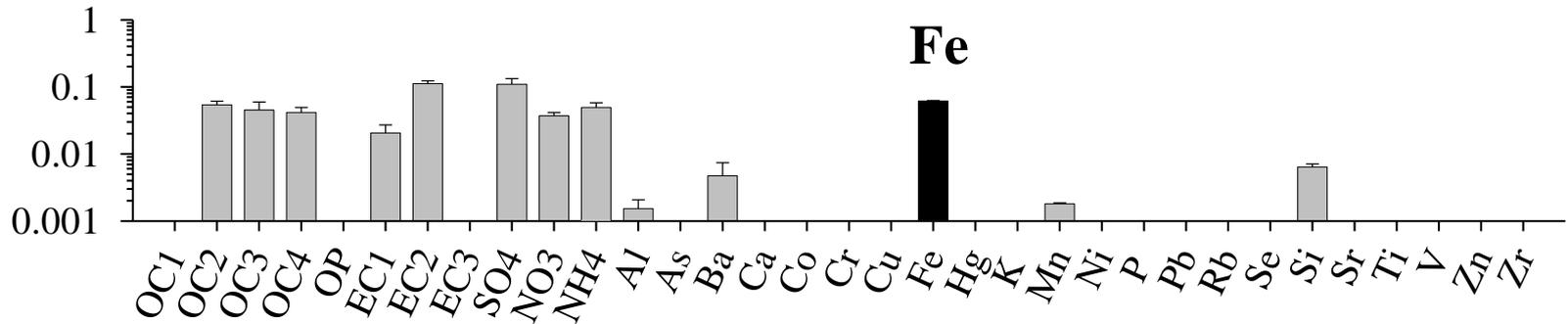
$m_{\Delta\Theta}$ 特定风电行业中样品超过限制水平的次数

$n_{\Delta\Theta}$ 该风电行业出现该类事件的总次数

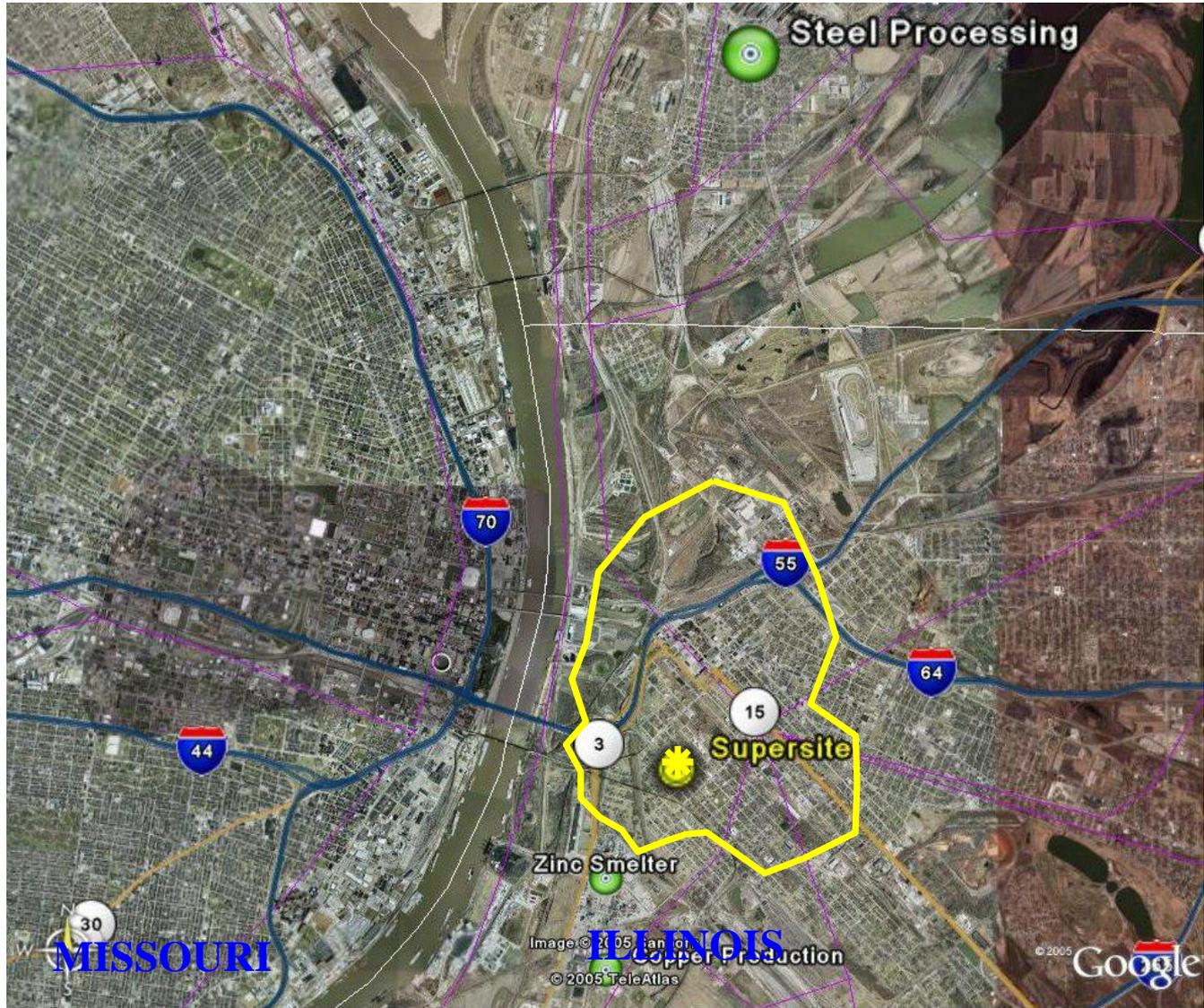
铅冶炼

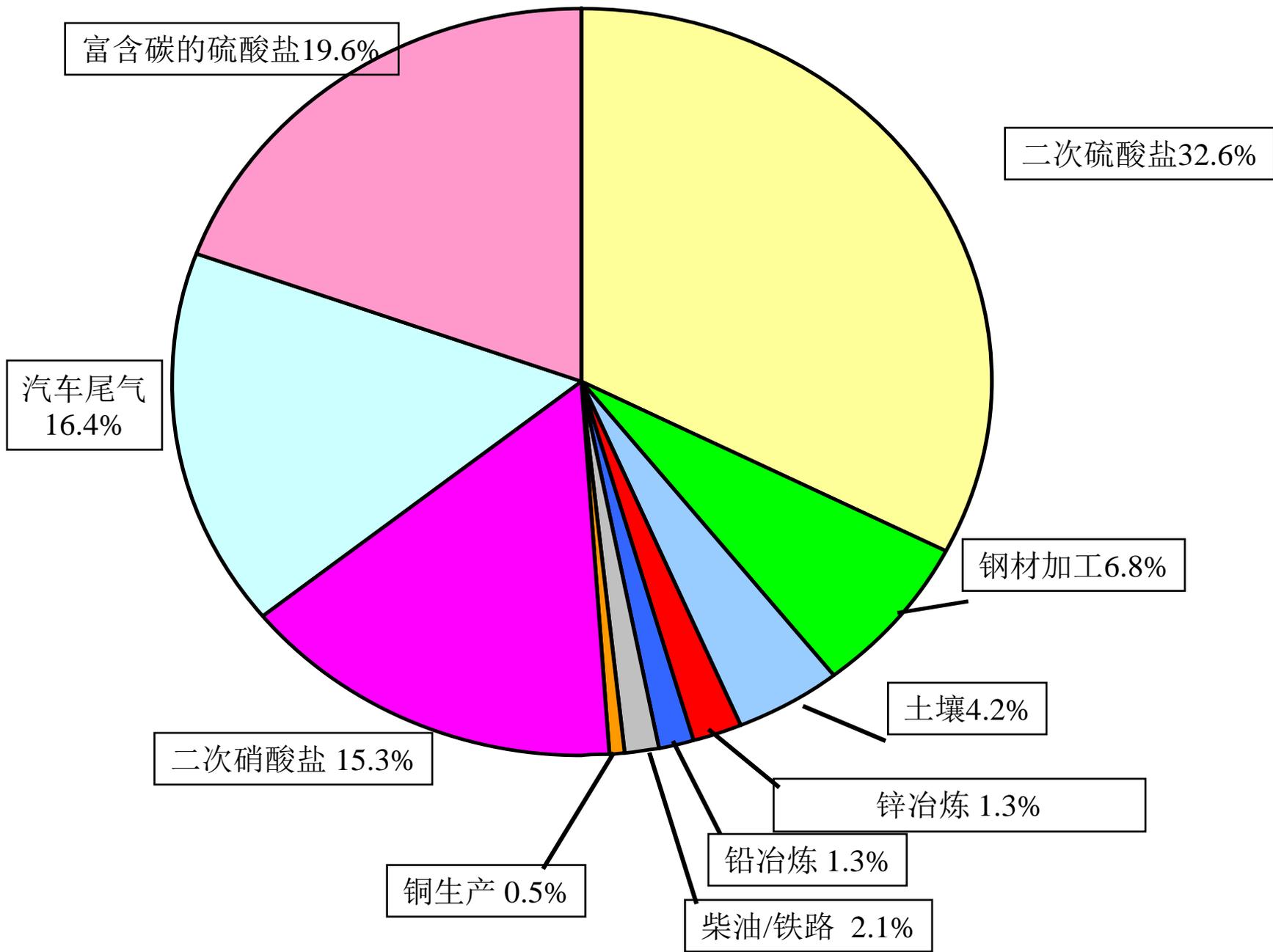


钢材加工



钢材加工





VOC数据分析

- 由于在大气中的反应性，对挥发性有机化合物（VOC）的数据进行分析将会是一个极大的挑战。
- 受体模型假定在从排放源传输至受体位点期间，排放源成分谱中的化学物质会呈现出惰性。
- 对于大多数VOC来说，这种假设是不成立的。

拟稳定近似法

- 假设从一个排放源释放出的物质与受体位点的测量相关，在获取稳定的排放源成分谱的不同的采样周期内，发生反应的量（排放源成分谱）是相同或极其类似的。

休斯顿高时间分辨率数据

- Zhao等人 (Environ. Sci. Technol. **2004**, 38, 1338-1347)在克萨斯州休斯敦市对PTR-MS数据进行了考察。
- 在5分钟的间隔内测出了14种挥发性有机物（甲醇、丙烯腈、异戊二烯、苯、甲苯、苯乙烯、C8-苯（二甲苯）、C7-酮、C9-苯、C10-烷基苯、C13-烷基苯、M43（丙烯）、M61（乙酸）和M87（乙酸乙烯酯））。
- 随后，我们将甲醇的影响排除在外，具体原因详见论文所述。

休斯顿高时间分辨率数据

- 我们观察到了两种不同类型的数据。
 - 化学物质在典型的运输条件下从排放源至监测点发生反应的正常数据
 - 排放物质未来得及发生反应就被迅速输送至监测点的卷流事件
- 不可能将这两种不同类型的数据纳入成一个分析中。

休斯顿高时间分辨率数据

- 我们确定了9种排放源：
- 其中有些是可识别的排放源，如汽油汽车和火花点火式汽车。
- 由于排放物成分和其他数据的可用性，很难明确说明其他排放源。

休斯顿PAMS数据

- 在休斯敦开展的一个较长期的研究中，我们通过一个自动化的气相色谱系统来收集VOC数据，对收集到的55种VOC进行了分析，这些物质是该区域臭氧形成的重要原因。
- Kim等人（大气环境 39（2005） 5934-5946）对PAMS数据进行了分析。

休斯顿PAMS数据

- 利用正矩阵因子分解（PMF），从下午9时至上午6时在休斯敦的三个监测点（鹿园、海登路和克林顿Dr.）对综合NMOC进行了测量，每小时测量一次。
- 只有在夜间收集到的NMOC数据可用于减少光化学、汽车和生物资源的影响。
- 2001年7月和2001年10月期间，共收集了401-883个样本，并对38-40种NMOC化学物质进行了测量和分析。

休斯顿PAMS数据

- 识别到的PMF
 - 鹿园（火炬气排放物、工业源、石油化工源，天然气/丙烷、炼油厂、异戊二烯源和机动车辆）
 - 海登路（火炬排放物、石化源、工业源、溶剂、天然气/丙烷、炼油厂和机动车辆），以及
 - 克林顿Dr.（火炬排放物、两个工业源、炼油厂、天然气/丙烷、机动车辆和异戊二烯）。

休斯顿PAMS数据

- 虽然排放源分别位于不同的地方，但在这三个观测点观测到了五种类似的排放源，表明有多个类似排放源存在。
- 通过指出排放源的可能方向，条件概率函数分析辅助了局部点源的识别。
- 结果与当地已知NMOC排放源位置吻合。

新泽西州PAMS数据

- 随后，我们用SUMMA滤毒罐对NJ PAMS数据进行了分析。
- 我们发现，其中存在严重的问题，因为在分析前后和/或白天期间，许多成分会发生氧化。
- 这些分析并没有得出任何有用的结果。

VOC分析

- 因此，VOC数据分析要比用粒子组成数据开展的分析困难得多。
- 这种分析还是可以开展的，但通过我的尝试及我在其他出版物或论文中看到的情况，我们不可能每次都能指定排放源，而且由于挥发性有机化合物会发生化学反应，这会让分析变得更为复杂。

谢谢!

欢迎提问