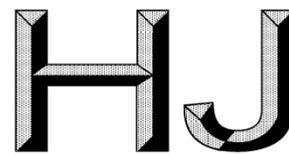


附件8



中华人民共和国国家生态环境标准

HJ □□□-20□□

---

环境空气 颗粒物来源解析 受体模型  
法监测数据处理与检验技术规范

Ambient air—Source apportionment on particulate matter—Technical  
specification for observation data processing and inspection by receptor  
models

（征求意见稿）

202□-□□-□□发布

202□-□□-□□实施

---

生态环境部 发布

# 目 次

前 言 .....	ii
1 适用范围.....	1
2 规范性引用文件.....	1
3 术语和定义.....	1
4 基本原则.....	2
5 监测数据的处理和检验.....	3
6 受体模型数据处理和检验.....	5
7 颗粒物质量和组分浓度异常值的判断.....	3
8 注意事项.....	8
附录 A（资料性附录）源成分谱的特征组分 .....	9

# 前 言

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》和《中华人民共和国大气污染防治法》，加强大气污染防治，保护和改善生态环境，保障人体健康，规范基于受体模型法的环境空气颗粒物来源解析工作，制定本标准。

本标准规定了基于受体模型法开展的环境空气颗粒物来源解析工作中监测数据的处理和检验。

本标准的附录A为资料性附录。

本标准属于环境空气颗粒物来源解析系列标准之一。

本标准为首次发布。

本标准由生态环境部大气环境司、法规与标准司组织制订。

本标准起草单位：中国环境监测总站、南开大学、陕西省环境监测中心站。

本标准生态环境部20□□年□□月□□日批准。

本标准自20□□年□□月□□日起实施。

本标准由生态环境部解释。

# 环境空气 颗粒物来源解析 受体模型法监测数据处理与检验技术规范

## 1 适用范围

本标准规定了基于受体模型法的环境空气颗粒物来源解析监测数据的处理和检验等活动的技术要求，包括涵盖从排放源样品和环境受体样品获得监测数据至受体模型计算过程。

本标准适用于手工采样-实验室分析-受体模型法开展的环境空气颗粒物来源解析的监测数据处理和检验工作。

## 2 规范性引用文件

本标准内容引用了下列文件或其中的条款，凡是注明日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本标准，凡是未注明日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本标准。

HJ 194 环境空气质量手工监测技术规范

HJ 618 环境空气 PM<sub>10</sub> 和 PM<sub>2.5</sub> 的测定 重量法

HJ 656 环境空气颗粒物（PM<sub>2.5</sub>）手工监测方法（重量法）技术规范

HJ 657 空气和废气 颗粒物中铅等金属元素的测定 电感耦合等离子体质谱法

HJ 777 空气和废气 颗粒物中金属元素的测定 电感耦合等离子体发射光谱法

HJ 799 环境空气 颗粒物中水溶性阴离子（F<sup>-</sup>、Cl<sup>-</sup>、Br<sup>-</sup>、NO<sub>2</sub><sup>-</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>、PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>、SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>）的测定 离子色谱法

HJ 800 环境空气 颗粒物中水溶性阳离子（Li<sup>+</sup>、Na<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>）的测定 离子色谱法

HJ 829 环境空气 颗粒物中无机元素的测定 能量色散 X 射线荧光光谱法

HJ 830 环境空气 颗粒物中无机元素的测定 波长色散 X 射线荧光光谱法

HJ □□□ 环境空气 颗粒物来源解析 正定矩阵因子分解（PMF）模型计算技术指南

HJ □□□ 环境空气 颗粒物来源解析 化学质量平衡（CMB）模型计算技术指南

HJ □□□ 环境空气 颗粒物来源解析 基于受体模型法的源解析技术规范

## 3 术语和定义

### 3.1

**颗粒物源成分谱** Source Chemical Profile

特定污染源类排放的相对稳定的颗粒物化学组分信息，简称颗粒物源谱。颗粒物源谱需包含该类污染源的标识组分。

### 3.2

**受体化学组成** Chemical Species

环境空气颗粒物中化学组分的浓度或占比信息。

### 3.3

#### 化学质量平衡模型 Chemical Mass Balance Model (CMB)

一种“源已知类”受体模型，即模型需要输入源成分谱的数据，通过在源和受体之间建立质量平衡关系来构建线性方程组，利用有效方差最小二乘的迭代计算方法得出各污染源对受体的贡献值。

### 3.4

#### 正定矩阵因子分解模型 Positive Matrix Factorization Model (PMF)

一种多元因子分析类模型，将样本数据的矩阵(X)分解为因子贡献矩阵(G)和因子谱矩阵(F)，对因子谱矩阵进行识别，并定量计算样本的因子贡献。在环境空气颗粒物来源解析中，应用正定矩阵因子分解模型(PMF)计算是通过对环境样品(受体)的化学组分数据进行分析，提取若干因子，利用标识组分将因子识别为不同的源类，再通过多元线性回归计算不同因子(源类)对环境样品的贡献。

### 3.5

#### 源标识组分 Tracer Species

污染源化学成分谱中对该源类有指示作用的一种或多种颗粒物化学成分，又称示踪组分。源标识组分是区别该源类与其他源类的重要标识物，每种污染源有各自的标识组分。标识组分在该源成分谱中的含量，比在其他源类中高。

### 3.6

#### 不确定度 Uncertainty

源解析工作中采样、实验分析等环节引起的误差。

### 3.7

#### 异常值 Outlier

监测时段内测定值中严重偏离平均值的不合理数据。

## 4 基本原则

在监测质量控制的基础上，通过数据之间的比较发现可能存在的问题，为结果核实或复测等提出依据。检验的原则包括以下几个方面：

a) 真实性：颗粒物质量浓度和化学组分的监测数据能够反映监测点位的真实情况，即所采集的滤膜样品能反映颗粒物的实际状况，分析数据结果能代表颗粒物中的化学组分含量。

b) 合理性：经过计算和检验，初步判断颗粒物浓度和化学组成不存在异常情况，结果可以接受，反映了结果的可靠性。

c) 完整性：按照颗粒物源解析工作方案取得系统性和连续性的有效样品，而且无缺漏地获得这些滤膜样品的监测结果及有关信息。

d) 一致性：同一城市或地区的不同点位之间的采样时间和采样方式、滤膜称量和化学组分分析方法、数据处理和模型运算方法以及用于计算和检验的数据等应该是一致的。

e) 代表性：某城市选择的采样站点应该能够代表该城市的基本情况，使收集的数据具有代表性。

## 5 监测数据的处理和检验

### 5.1 颗粒物质量浓度

对于同一点位的不同采样器、不同通道、不同材质滤膜的颗粒物质量浓度监测结果，需进行一元线性回归，分析结果之间的相关性。按照 HJ 194、HJ □□□ [环境空气 颗粒物来源解析 正定矩阵因子分解（PMF）模型计算技术指南]、HJ □□□ [环境空气 颗粒物来源解析 化学质量平衡（CMB）模型计算技术指南]的要求进行颗粒物样品的采集，按照 HJ 618 和 HJ 656 的要求对采样前、后颗粒物滤膜样品进行称量，计算颗粒物质量浓度。将上述监测结果以不同采样器、不同通道、不同材质滤膜的颗粒物质量浓度为横、纵坐标，分别进行一元线性回归，当线性相关系数  $r \geq 0.8$  时，认为监测结果具有较好的相关性。若线性相关系数  $r < 0.8$ ，应根据采样记录查找原因，对异常数据进行校准，必要时剔除异常数据。

### 5.2 颗粒物质量和组分浓度异常值的判断

颗粒物质量及其组分的浓度异常值，可通过浓度时间趋势图和线性相关图来初步判断。对于 PMF 模型，可以在模型运算中得到浓度散点图和浓度时间序列图，前者可以查看两个组分之间的散点图以及相关性和相关性，组分之间如果存在较高的线性关系表明组分可能来自同一排放源；后者可以显示化学组分浓度的时间变化情况，确定组分浓度的时间变化是否存在异常值（过高或过低）。此外，若一组样品中，仅有一两个组分为异常值，则可采用具有相同功能区的临近采样点位的相应组分监测结果，或可参考该时段临近的在线监测站点数据。若一组样品中多个组分均为异常值，则建议剔除该条样品。

### 5.3 颗粒物化学组分占比

源和受体样品中某种化学组分的质量浓度与颗粒物质量浓度的比值，即为这种颗粒物化学组分的占比，尤其是标识组分的占比，能够初步分析判断数据是否合理。例如，Si 是扬尘源的标识组分（即 Si 在扬尘源中占比要比 Si 在其他源中占比为高），扬尘源中 Si 的占比可达 10~15%，若受体颗粒物样品中 Si 的占比接近或明显高于此值，则可判定数据不太合理且有很高不确定性，建议重新检测。源成分谱的特征组分参考范围可参见附录 A。

注：石英滤膜的化学组分浓度要除以石英滤膜颗粒物质量浓度；有机滤膜的化学组分浓度要除以有机滤膜颗粒物质量浓度，以质量百分数为单位，反映实际监测与理论上的偏差。

### 5.4 颗粒物化学组分占比加和

颗粒物化学组分占比的加和应小于 100%，且以 40%~90%为宜，若不在此范围内，可能是某种或某些组分的测定结果偏高或偏低，故而影响了总体加和结果，应根据分析记录查找原因，必要时重新分析某些化学组分的浓度。若重新分析后仍不满足要求，建议剔除该条数据。

### 5.5 颗粒物化学质量浓度重构

在源解析模型运算之前，为检验颗粒物的主要成分是否完全分析，可将测定的化学组分浓度进行质量浓度重构，并与称重法获得的颗粒物质量浓度进行比较，根据二者差异大小来探讨颗粒物组分的质量平衡特征。化学质量重构侧重于对污染源类的初步分析，其结果可为明确污染治理对象，强化区域环境管理和科学决策提供支撑和指导。

颗粒物的主要化学组分包括有机物、元素碳、地壳类物质、无机盐（铵盐、硫酸盐和硝酸盐）等。一般采用表中的系数进行重构：

表 1 颗粒物化学质量浓度重构系数

化学组分	系数	重构后物质	化学组分	系数	重构后物质
有机碳	1.6	有机物	钾	1.2	含钾化合物
元素碳	1	元素碳	钛	1.67	含钛化合物
硅	2.14	含硅化合物	铵根	1	铵盐
铝	1.89	含铝化合物	硫酸根	1.375	硫酸盐
铁	1.43	含铁化合物	硝酸根	1.29	硝酸盐
钙	1.4	含钙化合物			

不同的地区、不同季节可有不同的化学浓度质量重构方案，即系数存在地域性和季节性差异。

对于有机物和 OC 间的系数，通常假定对应于每克碳含有 0.2~0.4 g 其他元素（如 O、H 和 N 等），即以 1.4~2.0 代表 OM 相对于每克 OC 的平均分子量，一般情况下对城市地区的气溶胶取 1.6 比较合适，夏季大气氧化性较强时可以取 1.8，冬季大气氧化性较弱时可以取 1.4。

地壳类物质通常以特定元素的氧化物浓度相加的方法进行估算，元素的测定方法及结果的质控要求参见 HJ 657、HJ 777、HJ 829 和 HJ 830。一般假定由 6 种元素的氧化物组成，即 SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub>、CaO、FeO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 和 K<sub>2</sub>O 等，其中包括构成大陆地壳物质最重要的 8 种化合物中的 6 种，另外 2 种氧化物 Na<sub>2</sub>O 和 MgO 约分别占地壳物质质量的 3%。对于地壳类物质的转化系数，也存在一些地域性差异。

质量浓度重构之后化学组分的加和在 80%~120%为宜，可以和称量的偏差作比较，若不在此范围内，应根据采样记录和分析记录查找原因，并对异常组分进行复测。

## 5.6 PM<sub>2.5</sub>与PM<sub>10</sub>比值

利用颗粒物浓度比值分析不同时空条件下、不同粒径的颗粒物主导源类。计算不同季节、不同点位（或区域）的PM<sub>2.5</sub>/PM<sub>10</sub>比值，并结合当地排放源与气象特征等开展，判断该季节、该点位（或区域）大气颗粒污染特征。在同一采样条件下（采样时间、地点及气象条件等条件相同），颗粒物质量浓度值的监测比值可初步确定污染类型：

a) PM<sub>2.5</sub>浓度应当小于PM<sub>10</sub>，该比值在一定程度上可以说明污染类型（细颗粒污染为主或可吸入颗粒物污染为主）以及可能的污染物来源。

b) 当PM<sub>2.5</sub>/PM<sub>10</sub>比值较高时，细颗粒物污染较重，表明监测区域内与细颗粒物排放源或二次细颗粒相关的排放源类的影响较高；反之，表明监测区域可吸入颗粒物源类（如扬尘）的影响可能较高。

c) 从季节角度分析，通常PM<sub>2.5</sub>浓度峰值出现在秋冬季，而PM<sub>10</sub>浓度峰值出现在春季（如沙尘季节），故该比值在季节变化规律中呈现出秋冬高，春季低的特征。

## 5.7 阴阳离子平衡

按照HJ 799、HJ 800等要求测定颗粒物中的阴阳离子，包括Na<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、K<sup>+</sup>、Mg<sup>2+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>、Cl<sup>-</sup>、F<sup>-</sup>等，并根据下列公式计算阴阳离子平衡：

$$AE = (2 \times SO_4^{2-} / 96) + (NO_3^- / 62) + (Cl^- / 35.5) + (F^- / 19) \quad (1)$$

$$CE = (Na^+/23) + (NH_4^+/18) + (K^+/39) + (2 \times Mg^{2+}/24) + (2 \times Ca^{2+}/40) \quad (2)$$

式中，AE代表阳离子，CE代表阴离子。

对AE和CE进行一元线性回归，当线性相关系数 $r \geq 0.8$ 时，认为阴阳离子接近平衡，且斜率应该在0.7~1.2范围内，若不在此范围，说明可能部分阴阳离子未检出或测定结果有偏差，需对部分样品的异常组分进行复测。

注：AE/CE不可用来判断颗粒物的酸碱性。

## 5.8 同类组分趋势分析

在颗粒物组分的定量研究中，既可以根据HJ 657、HJ 777、HJ 829和HJ 830等要求测定颗粒物中的无机元素的含量，即该元素的总浓度（可溶态与不可溶态的浓度之和），也可以根据HJ 799、HJ 800等测定其水溶性离子的浓度值（如 $Ca^{2+}$ 、 $Mg^{2+}$ 和 $Na^+$ 等）。如果两个方法均采用，可将两组结果进行比较，评估元素总量与其可溶态离子含量的变化趋势是否一致，进而判断结果的可靠性。通过评估元素及其可溶态离子含量的变化趋势以及一些比值大小，可以检验数据是否合理，若有数据的同类组分未满足该趋势，说明该条数据可能有问题，需重新测定元素及离子浓度。例如，离子态浓度与元素浓度之比应该小于1；且由于 $Ca^{2+}$ 是难溶性组分， $Ca^{2+}/Ca$ 比值应该小于 $Na^+/Na$ 比值。在进行源解析时，一般采用元素测量值，而不是离子测量值。若采用离子浓度作为受体模型的数据来源，则要考虑结果是否存在低估。

## 5.9 组分间季节差异分析

通过对比组分间的季节性差异，可以评估数据是否合理。若出现异常数据，则需先检查测定过程是否合理。如异常数据是由于污染过程导致，则不可剔除；如异常数据是由于采样、测定过程的误差造成，则进行异常数据的剔除。就浓度水平而言，秋冬采暖季由于不利的气象条件与排放源排放增加等因素，颗粒物浓度水平比春夏季相对较高，且化学组分浓度水平（如OC和EC、 $NO_3^-$ 、 $SO_4^{2-}$ 、 $NH_4^+$ 及SOC等二次颗粒物）也比春夏季相对较高。就化学组分占比而言，冬季 $NO_3^-$ 占比较夏季高，夏季 $SO_4^{2-}$ 占比较冬季高；春季多有风沙，扬尘源的影响明显增加，Ca、Si等占比高。此外，由于春秋存在秸秆焚烧等现象，故生物质燃烧贡献相关的 $K^+$ 等占比相对较高。在上述由于污染过程导致的组分较高的情况，不可轻易剔除较高的监测数值。

## 5.10 缺失值

若一组样品中少量组分数据缺失，可采用具有相同功能区的临近采样点位的相应的组分分析结果，或可参考该时段临近的在线监测站点浓度数据。若一组样品中多个重要组分（标识组分）均有缺失，则建议剔除该条样品；如果是痕量组分缺失，由于源解析计算时痕量组分对解析结果的影响较低，建议可以用1/2检出限替代。对于PMF模型而言，为了得到较为靠谱的源解析结果，每个点位应保证至少100个完整的有效样品，因此采样和分析过程的规范性尤为重要。

# 6 受体模型数据处理和检验

## 6.1 PMF模型

### 6.1.1 模型数据准备

PMF模型需要输入至少100个有效受体样品信息，能够涵盖一个完整的排放源排放周期。受体样品信息包括环境空气颗粒物质量浓度、化学组分浓度数据以及相应的不确定度。一般而言，输入的颗粒物组分和样品数量越多，PMF模型计算结果越稳定。应用PMF模型进行颗粒物源解析计算至少需要10~20种组分，应包括主要组分（如OC、EC、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>、Cl<sup>-</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、Al、Si、Ca、Fe、Cu、Zn等组分）。若非标识组分数据缺失，该条数据仍可继续纳入计算；若某些标识组分缺失，则需要判断与该标识组分具有相同标识作用的其他标识组分是否进行了监测分析，例如，Cu和Zn均可作为机动车排放源的标识组分，若该条数据缺失Cu元素，而有Zn元素，那么该条数据仍可纳入模型。而当一种源类的所有标识组分均缺失时，则不可将条数据纳入模型，例如，同时缺少SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>和NH<sub>4</sub><sup>+</sup>组分时则无法识别二次硫酸盐。因此，在纳入模型时，要确保标识组分的数量尽可能多（至少大于10种），以提高模型结果的稳定性。

根据模型的要求对源谱数据和受体数据进行预处理，通过各组分的质量百分占比（%）合并成一套颗粒物及化学组分数据，方法为：

a) 先将滤膜上颗粒物化学组分质量浓度除以对应滤膜的颗粒物质量浓度，得到相应的质量百分占比含量；

b) 再将每个样品的各组分质量百分占比含量乘以相同的颗粒物质量浓度（如石英滤膜和有机滤膜的颗粒物质量浓度均值），最终合并成一套输入PMF模型的数据（单位μg/m<sup>3</sup>）；

c) 不确定度直接影响输入PMF模型中样品颗粒物质量浓度及组分浓度数据的计算权重。可参考以下计算方法进行计算：

当组分浓度≤检出限时，不确定度=5/6×检出限。

当组分浓度>检出限时，

$$\text{不确定度} = \sqrt{(\text{不确定度系数} \times \text{组分浓度})^2 + (0.5 \times \text{检出限})^2}$$

建议不确定度系数的范围为 0.1~0.6，对于不稳定或者浓度接近检出限的组分，可采用较大的不确定度系数。

最终得到的两个输入数据文件，分别为颗粒物及组分质量浓度的数据文件和颗粒物及组分质量浓度不确定度的数据文件。

### 6.1.2 模型检验

在进行正式的 PMF 模型计算前，需要对输入的数据进行初步检验，设定计算权重，剔除或降低异常值的影响。根据 S/N（信噪比）值确定 PMF 中组分的计算权重，权重包括差（Bad）、弱（Weak）和强（Strong）三个水平。建议将颗粒物重要标识组分的权重设为“强”（Strong）。通过浓度散点图、时间序列图等，查看不同组分之间关系、组分随时间变化情况，初步排除异常数据。

通过 PMF 模型的基础计算（base run），可得到多个计算结果。通过 Q<sub>Robust</sub>、Q<sub>True</sub>、是否收敛（Converged）等参数，初步选择查看特定的计算结果。基础计算的结果主要包括因子谱和因子贡献，主要从残差分析（Residual Analysis）、观测值/预测值差异等方面判断结果的好坏。如果残差直方图显示残差范围在（-3，+3）之间，且呈正态分布，则该组分的模型计算结果在数学意义上较好；如果组分具有许多大尺度残差或显示非正常曲线，则表示该组分在数学意义上计算较差，应重新检查因子个数或输入的不确定度。如果某组分的输入值和预测值之间有强相关性，则表明该组分计算较好；反之，则考虑是否应该降低该组分计算权重或从计算中排除。此外，还可以在时

间序列上分析组分的输入值和预测值的差异。对于预测值明显高于输入值，需要进一步分析确定是否排除该数据。

得到模型基础计算结果之后，需要进行结果误差评估，确定计算结果的不确定度。结果误差评估方法主要有 BS 误差评估（Bootstrap Error Estimation）、DISP 误差评估（Displacement Error Estimation）、BS-DISP 误差评估（Bootstrap-Displacement Error Estimation）等。推荐采用 BS 误差评估方法评估模型计算结果（不确定度）的误差：如某些组分的分布较宽，则表明该组分模型计算的结果的不确定度可能较高；如果某些组分的箱型图上下距较窄，则说明该组分模型计算结果的不确定度可能较低。

## 6.2 CMB模型

### 6.2.1 模型数据准备

CMB模型需要输入源成分谱数据和受体浓度数据，受体组分的数量要大于源的数量。源和受体的化学组分主要包括无机元素、碳组分、水溶性离子等，这些组分涵盖了主要排放源的标识组分，如OC、EC、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>、Cl<sup>-</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、Al、Si、Ca、Fe、Cu、Zn等组分。由于CMB的受体输入数据是一段时间的平均值，可反应该时间段内的平均状态，因此，若某个样品中有组分存在个别缺失值，但对该组分的平均值影响较小，则该样品仍可继续纳入计算。

颗粒物受体样品通常由石英滤膜和有机滤膜（如特氟龙、聚丙烯等）平行采集得到，石英滤膜常用于分析有机组分，有机滤膜常用于分析无机组分。需要先计算各组分的质量百分占比（%），再进而合并。主要采用以下两种方法：

a) 将化学组分含量代入模型。每个样品不同滤膜上化学组分的质量浓度，按照不同滤膜称量的颗粒物浓度进行加权计算，受体化学组分分别转化为质量百分占比（%），转化方式为：

$$\text{有机滤膜的化学组分含量} = \frac{\text{有机滤膜上化学组分的浓度}}{\text{有机滤膜的颗粒物质量浓度}} \times 100\% ;$$

$$\text{石英滤膜的化学组分含量} = \frac{\text{石英滤膜上化学组分的浓度}}{\text{石英滤膜的颗粒物质量浓度}} \times 100\% 。$$

注：受体浓度数据组分百分含量加和需小于100%。

b) 将折算后的质量浓度数据（μg/m<sup>3</sup>）代入模型。在 a) 的基础上，每个滤膜的化学组分含量乘以重构后的颗粒物质量浓度（即石英滤膜和有机滤膜的浓度均值）得到的结果。

注：在构建受体化学组成时，不能直接将两张滤膜分析得到的化学组分浓度（μg/m<sup>3</sup>）简单合并成一套受体化学组成数据，直接代入模型计算。

源谱的化学组分含量参考 a) 的转化方式（不乘以 100%），单位为 g/g 或 μg/μg；源谱化学组分含量加和需小于 1。

### 6.2.2 模型诊断

CMB 模型诊断指标包括“源贡献值计算优度回归诊断指标”和“化学组分计算优度诊断指标”。

源贡献值计算优度回归的诊断指标包括：①t-统计（TSTAT）是源贡献计算值S<sub>j</sub>和源贡献的标准偏差值σ<sub>S<sub>j</sub></sub>的比值：TSTAT ≥ 2.0 说明拟合结果好，如果 TSTAT < 2.0 则表示源贡献值低于它的检出限，说明拟合结果不好，但在实际解析工作中，由于共线性源类等因素的存在，TSTAT 难以全

部大于 2.0。②残差平方和 ( $\chi^2$ ):  $\chi^2 < 1$ , 表示计算结果好;  $\chi^2 < 2$ , 表示计算结果可以接受; 如果  $\chi^2 > 4$ , 表示计算结果差, 有可能是一个或几个化学组分的浓度不能够很好地参与计算。③自由度 ( $df$ ): 只有当  $df \geq 0$  即  $I \geq J$  时, CMB 方程组的解才为正值, 否则模型无法计算。④拟合优度 ( $R^2$ ):  $R^2$  取值在 0~1 之间。该值越接近于 1, 说明源贡献值的计算值越接近测量值; 当  $R^2 < 0.8$  时, 定义为计算结果不好。⑤百分质量 ( $PM$ ): 值理论上应为 100%, 在 80%~120%是可以接受的, 若该值小于 80%, 说明有可能丢失了某个源类的贡献。

化学组分计算优度的诊断指标包括: ① $C/M$ : 即化学组分浓度计算值 ( $C$ ) 与化学组分浓度测量值 ( $M$ ) 之比值, 越接近于 1 说明化学组分浓度计算值与测量值越接近。通常各源标识组分的  $C/M$  值应该在 0.8~1.2 范围之内。如果低于 0.8, 表明某一源类可能低估; 如果高于 1.2, 表明某一源类可能高估。② $R/U$ : 即计算值和测量值之差 ( $R$ ) 与二者标准偏差平方和的方根 ( $U$ ) 之比, 当某化学组分的  $|R/U| > 2.0$  时, 该化学组分就需要引起重视: 如果该比值为正, 那么可能有一个或多个源的成分谱对这个化学组分的贡献值被高估; 如果该比值为负, 那么可能有一个或多个源成分谱对这个化学组分的贡献值被低估, 甚至可能是由于有某个源成分谱未纳入模型计算。

## 7 注意事项

7.1 可采用多种模型进行解析对模型结果进行评估, 不同模型解析结果中主要源类贡献的相对关系应基本一致, 结果能相互印证。

7.2 颗粒物来源解析结果应能够反映当地颗粒物污染的时空变化规律 (不同季节、不同污染过程等), 可充分利用日常在线监测的结果, 评估不同季节颗粒物来源解析结果的合理性。

7.3 结合当地的工业布局、气象条件、排放源的空间特征及季节性变化规律等综合判断解析结果的有效性。

附录 A  
(资料性附录)  
源成分谱的特征组分

源成分谱的特征组分参考范围如下。

表 A.1 源成分谱特征组分占比参考范围

源类	标识组分 1	占比	标识组分 2	占比	标识组分 3	占比	标识组分 4	占比
扬尘	Si	10~15%	-	-	-	-	-	-
燃煤源	OC	10-15%	EC	5~10%	Cl <sup>-</sup>	2~5%	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	5~15%
移动源	OC	20~30%	EC	15~25%	-	-	-	-
生物质燃烧源	EC	10~20%	OC	10~30%	K 或 K <sup>+</sup>	5~10%	-	-
二次硫酸盐	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	75%	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	25%	-	-	-	-
二次硝酸盐	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	72%	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	28%	-	-	-	-
施工扬尘	Ca	15~25%	-	-	-	-	-	-
钢铁源	Fe	10~20%	-	-	-	-	-	-