分类号_____ 密级_____

UDC _____ 编号_____

中国科学院研究生院

博士学位论文

用 SiLSM 研究 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 交换的控制机制和敏感性

肖　薇

指导教师 于强研究员 博士 中国科学院地理科学与资源研究所

李旭辉教授 博士 美国耶鲁大学森林与环境学院

申请学位级别 博士学位 学科专业名称 生态学

论文提交日期 **2009.3** 论文答辩日期 **2009.5**

培养单位 中国科学院地理科学与资源研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席_____

Classification No._____ Confidential_____

UDC _____ No. _____

Graduate University of Chinese Academy of Sciences

Doctor Thesis

Using a Simple Isotopic Land Surface Model (SiLSM) to investigate the controls and sensitivity of oxygen isotopic CO_2 and H_2O exchange

Wei XIAO

Advisor Prof. Qiang Yu Institute of Geographic Sciences and Natural Resources Research, CAS

Prof. Xuhui Lee School of Forestry and Environmental Studies, Yale University (USA)

Application Degree PhD Major Ecology

Submitted Date March, 2009 Defence Date May, 2009

Education Unit Institute of Geographic Sciences and Natural Resources Research, CAS

Degree Awarding Unit Graduate University of Chinese Academy of Sciences

Chairman of committee_____

独 创 性 声 明

本人声明所呈交的论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得中国科学院或其它教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

研究生签名：　　时间：　　年　月　日

关于论文使用授权的声明

本人完全了解中国科学院有关保留、使用学位论文的规定，即：中国科学院有权保留送交论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。同意中国科学院可以用不同方式在不同媒体上发表、传播学位论文的全部或部分内容。

(保密的学位论文在解密后应遵守此协议)

研究生签名：　　时间：　　年　月　日

导师签名：　　时间：　　年　月　日

本研究由中国科学院国际合作计划“人类活动与生态系统变化”(资助项目 **CXTD-Z2005-1**，项目负责人为 Xuhui Lee 和于强)、美国国家自然科学基金(资助项目 **DEB-0514904** 和 **DEB-0514908**，项目负责人为 Xuhui Lee 和 Timothy J. Griffis)资助、美国国家自然科学基金成就奖(**ATM-0546476**，Timothy J. Griffis)。本文作者获得国家留学基金资助赴美国耶鲁大学访问学习一年。

This research was supported by the Chinese Academy of Sciences International Partnership Project (grant no **CXTD-Z2005-1**, to XL and QY), the U. S. National Science Foundation through grants (**DEB-0514904** and **DEB-0514908** to XL and TG) and a Rice Family Foundation grant (to XL), and the U. S. National Science Foundation Career Award (**ATM-0546476** to TG). The author also acknowledges a visiting doctoral fellowship from the State Scholarship Fund of China.

摘　要

CO_2和H_2O的氧同位素(^{18}O-CO_2和^{18}O-H_2O)信号能为陆地植被在全球CO_2和H_2O循环的贡献提供独特的信息，而陆面过程模型(LSM)能有效地将陆地生态系统CO_2和H_2O 交换的同位素分馏过程与生态系统的水、热和 CO_2 交换过程相结合。但是由于缺乏野外条件下观测的高分辨率同位素数据，同位素 LSM 的开发和验证受到限制。耶鲁大学生物气象学研究组和明尼苏达大学生物气象学研究组合作，于 2006 年首次应用 TDL 技术对生态系统尺度上 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 通量进行的同步连续观测，这为同位素 LSM 的验证提供了可靠的高分辨率数据，使得通过建立模型验证目前最新的理论成为可能。本文中，我们建立了一个简单同位素陆面过程模型(SiLSM)模拟陆地和大气之间 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 同位素交换的控制过程，将控制同位素交换的分馏过程的最新试验结果和理论知识结合起来：该模型包括一个标准 LSM、叶片水同位素含量非稳态理论、冠层动力学分馏系数(考虑了空气动力学湍流扩散的作用)和大气 ^{18}O-CO_2 同位素通量大叶模型。SiLSM 模型的驱动因子为植物因子、常规微气象观测因子和参考高度上大气 CO_2 和水汽的 ^{18}O 含量、茎杆水和土壤水的 ^{18}O-H_2O 含量。输出变量为叶片水和蒸腾水的 ^{18}O-H_2O 含量，以及 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力。SiLSM 能模拟出无结露时段蒸腾的同位素含量和中午叶片体积水的同位素含量。SiLSM 模型对 ^{18}O-CO_2 同位素通量的模拟远高于涡度相关方法的观测值。模型敏感性分析表明野外条件生长的大豆叶片内 CO_2 水合效率远小于之前的研究结果；能量平衡闭合对模型验证有较大的影响；大气 CO_2 浓度使得 ^{18}O-CO_2 同位素通量上升，但 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力上升不明显；RH 和 T_a 上升会降低同位素通量。环境因子如何控制水合效率以及如何将其从叶片向冠层进行尺度扩展等问题，仍有待于进一步研究。

关键词：SiLSM 模型，^{18}O-H_2O 含量，^{18}O-CO_2 同位素驱动力，冠层尺度，大豆

Abstract

The oxygen isotopes of CO_2 and H_2O (^{18}O-CO_2 and ^{18}O-H_2O) provide unique information regarding the contribution of terrestrial vegetation to the global CO_2 and H_2O cycles. Land surface models (LSMs) are powerful tools to combine the isotopic fractionation processes of terrestrial ecosystem CO_2 and H_2O with the water, heat and CO_2 exchange in ecosystem. While the lack of high-resolution isotopic data measured under field condition inhibited the development and validation of LSMs. With the collaboration of biometeorology group of Yale University and University of Minnesota, TDL technique was used to measure the ecosystem ^{18}O-H_2O and ^{18}O-CO_2 exchange simultaneously in 2006 for the first time, which provided reliable high resolution data for the validation of isotopic LSM and made it possible to validate the latest theories. In this paper, a simple isotopic land surface model (SiLSM) was developed to simulate processes controlling the isotopic exchange of ^{18}O-H_2O and ^{18}O-CO_2 between the land and the atmosphere. We included the following in a standard LSM, a non-steady state theory of leaf water isotopic composition, a canopy kinetic fractionation factor (considering the effect of aerodynamic turbulence diffusion), and a big-leaf parameterization of the ^{18}O-CO_2 isoforcing on the atmosphere. The model was driven by plant factors; routine meteorological variables; and oxygen isotope concentration of atmospheric CO_2 and H_2O, ^{18}O-H_2O concentration of xylem water and soil water. The output variables were the ^{18}O-H_2O concentration of bulk leaf water and evapotranspiration, and ^{18}O-CO_2 isoforcing. SiLSM captured the temporal dynamics of the isotopic composition of evapotranspiration in dew-free periods and that of the bulk leaf water in midday hours. SiLSM prediction of the eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing was biased high in comparison to the observations made with the eddy covariance method. Model sensitivity analysis suggested that the CO_2 hydration efficiency must have been much lower in the leaves of soybean in field conditions than previous thought; the energy imbalance had a significant effect on model validation; the elevation of atmospheric CO_2 concentration increased eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing but did not change ^{18}O-CO_2 isoforcing; the elevation of RH and T_a reduced the eddy isoforcing. Understanding the environmental controls on the hydration efficiency and the scaling from the leaf to the canopy represents an area in need of more research.

Key words: SiLSM model; ^{18}O-H_2O concentration; ^{18}O-CO_2 isoforcing; Canopy Scale; Soybean

目　录

摘　要 1

ABSTRACT 2

第一章 绪论 1

1.1 研究背景 1

1.1.1 同位素的基本概念 1

1.1.2 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 的观测方法进展 3

1.1.3 生态系统 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 交换的理论进展 7

1.2 研究动机 12

1.3 研究目标、创新点和内容 13

1.3.1 研究目标 13

1.3.2 研究创新点 14

1.3.3 论文内容 14

第二章 试验站点和观测方法 15

2.1 试验站点 15

2.2 同位素观测 16

2.3 通量和小气候观测 17

第三章 模型描述 19

3.1 模型结构 19

3.2 理论 21

3.2.1 水、热和 CO_2 通量 21

3.2.2 阻力计算 24

3.2.3 同位素分馏效应 26

3.2.4 叶片 ^{18}O-H_2O 含量非稳态理论 27

3.2.5 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力子模型 28

3.3 参数化方法 29

第四章 模型驱动因子观测值 31

4.1 植物因子观测值 31

4.2 环境因子观测值 32

4.3 同位素观测值 37

第五章 模型结果 41

5.1 水、热和 CO_2 通量 41

5.2 叶片水和蒸腾水的 ^{18}O 含量 45
5.2.1 叶片水的 ^{18}O-H_2O 含量模拟 45
5.2.2 蒸腾水的 ^{18}O-H_2O 含量模拟 46
5.3 ^{18}O-CO_2 同位素通量 47
第六章 敏感性分析 51
6.1 模型参数 51
6.1.1 CO_2 水合程度 51
6.1.2 土壤阻力 53
6.2 子模型不同处理方法 53
6.2.1 能量平衡闭合性 53
6.2.2 非稳态效应 53
6.2.3 动力学分馏系数 56
6.3 驱动因子 56
6.3.1 大气 CO_2 浓度 56
6.3.2 空气温度和相对湿度 56
6.3.3 冠层高度和风速 56
6.3.4 土壤湿度 59
第七章 讨论和结论 61
7.1 讨论 61
7.1.1 能量不平衡对模型的影响 61
7.1.2 CO_2 水合程度 62
7.1.3 CO_2 浓度、湿度和温度上升的影响 63
7.2 结论 63
参考文献 65
附录 1 SILSM 模型符号表 79
附录 2 同位素观测方法 85
A2.1 TGA 简介 85
A2.2 冠层 ^{18}O-H_2O 的观测 87
A2.3 ^{18}O-CO_2 通量观测的理论和方法 90
致谢 95
作者简历 97

第一章 绪论

1.1 研究背景

研究 ^{18}O-CO_2 和 ^{18}O-H_2O 的交换能够为陆地和大气之间水碳交换提供约束条件。$H_2{}^{18}O$ 分子的水汽压和扩散率比 $H_2{}^{16}O$ 分子低，因此在蒸腾过程中前者更容易在叶片水中累积。光合作用中，CO_2 扩散进入叶片，溶解于叶片水，CO_2 与 H_2O 分子在碳酸酐酶(CA)的催化作用下交换氧原子，从而携带 ^{18}O 信号。其中大约 1/3 被 C_3 光合作用固定(C_4 更多)，剩余的 2/3 在与叶片水同位素平衡后扩散回大气，这些从叶片扩散回大气的 CO_2 分子便携带了叶片水的同位素信号[*Farquhar et al.*, 1993]。了解控制陆地－大气间 ^{18}O-CO_2 和 ^{18}O-H_2O 交换的分馏过程和控制机制，有助于我们解决全球碳水循环中的一些重要问题，如我们仍无法解释大气同位素含量的长期变化，无法解释这种变化是否与气候变化、土地利用变化和其他人类活动相关。

1.1.1 同位素的基本概念

自然界中，氧有三种稳定同位素(^{16}O、^{17}O、^{18}O)，其中，$H_2{}^{18}O$ 和 $^{12}C^{18}O^{16}O$($C^{18}OO$)在陆地生态系统对全球 CO_2 通量贡献的研究中具有重要的意义，本文将主要研究二者在生物和土壤水体中的含量，以及在生态系统中的通量。

自然水样的 $H_2{}^{18}O$ 含量的国际公认测量标准为 Vienna Standard Mean Ocean Water，V-SMOW(Coplen 等，1996)。V-SMOW 的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比为：

$$R_{\mathrm{VSMOW}} = 2.0052 \times 10^{-3} \text{ [}\textit{Baertschi}\text{, 1976]}$$

CO_2 中 $C^{18}OO$ 含量的国际公认测量标准为 Vienna PeeDee Belemnite(VPDB-CO_2)标准，其 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比为：

$$R_{\mathrm{VPDB}} = 2.088349077 \times 10^{-3} \text{ [}\textit{Allison et al.}\text{, 1995]}$$

通常，用 δ 符号表示重同位素含量，单位为千分之一(‰)。

$$\delta = \left(\frac{R_{sample}}{R_{s\tan dard}} - 1 \right) \times 1000,\ ‰ \tag{1.1}$$

其中 R_{sample} 和 R_{standard} 分别是样品和标准的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比。

(1) 同位素的平衡分馏效应

a) 蒸发过程中水的同位素平衡分馏效应

陆地生态系统与大气中的水汽交换包括蒸腾和蒸发两种不同的生物和物理过程。在水分的蒸发过程中，轻同位素比重同位素蒸发得更快，所以在液态中的重同位素含量比气态中的高，这种效应被称为平衡效应(Equilibrium effect)，可以用平衡分馏系数 α_{eq} 来表示，即

$$\alpha_{eq}=R_L/R_V \tag{1.2}$$

其中：R_L、R_V 分别为液态和气态中的轻和重同位素比率。

当系统处于热动力学平衡时，平衡分馏系数 α_{eq} 对应于常态水(H_2O)和“重”水($H_2{}^{18}O$)的饱和水汽压之比，主要取决于温度[*Majoube*, 1971]。

为表达方便，我们采用 ε_{eq} 作为平衡分馏系数，

$$\varepsilon_{eq}=(1-\frac{1}{\alpha_{eq}})\times 1000\text{，‰} \tag{1.3}$$

b) CO_2 与液态水的同位素平衡分馏效应

光合作用中，大气中的 CO_2 扩散进入叶片，溶解于水(被 CA 催化)，并迅速与叶绿体(C_3 叶片)或叶肉(C_4 叶片)中的水交换氧原子。其中大约 1/3 被 C_3 光合作用固定(C_4 更多)，剩余的 2/3 在与叶片水同位素平衡后扩散回大气，CO_2 与水的同位素平衡为：

$$H_2{}^{18}O_{(l)}+CO_{2(g)}\leftrightarrow H^{+}+[HCO_2{}^{18}O]^{-}{}_{(aq)}\leftrightarrow H_2O_{(l)}+CO^{18}O_{(g)} \tag{1.4}$$

CO_2 和水的氧同位素平衡分馏系数 $\varepsilon_{eq\text{-}co2}$ 随温度而变化：

$$\varepsilon_{eq-co2}=\frac{17604}{T}-17.93\text{，}\quad ‰ \tag{1.5}$$

其中 $d\varepsilon_{eq\text{-}co2}/dT$= -0.20‰/°C，所以 25°C 时，$\varepsilon_{eq\text{-}co2}$＝41.11‰[*Brenninkmeier et al.*, 1983]。水必须是液态，才会发生这种水合作用。因为中间物有 3 个氧原子，所以同位素反应的恒定速度是化学反应速度的 2/3 [*Mills and Urey*, 1940]。叶片和微生物中普遍存在碳酸酐酶，有了它的催化作用，以上反应几乎可以瞬间完成。通常认为，平衡反应中的水量是 CO_2 量的很多倍，所以不论其初始 $\delta^{18}O$ 是多少，同位素平衡的 CO_2 都会与其溶解的水氧同位素比相同。

(2) 同位素的动力分馏效应

自然条件下，热动力学平衡条件通常不能满足，例如水从开放水面向未饱和大气蒸发时，相对湿度小于 100%，这种情况下，轻、重水分子通过水和大气交界面的粘滞边界层时，微小的传输差异都会产生额外的分馏。轻同位素比重同位素扩散得更快，这种效应称为动力学分馏效应(Kinetic fractionation effect)，用动力学分馏系数 α_k 表示：

$$\alpha_k=D/D'=g/g' \tag{1.6}$$

式中，D 和 D'分别为轻和重同位素的扩散系数；g 和 g'分别是轻和重同位素的导度。

对于 $H_2{}^{18}O$ 的动力分馏系数，最初由 *Farquhar* 等[1989]定义为

$$\varepsilon_k^w = \frac{28r_c^w + 19r_b^w}{r_b^w + r_c^w}, \quad ‰ \tag{1.7}$$

根据 *Cappa*[2003]对同位素分子扩散系数的观测，28 和 19 分别调整为 32 和 21。

Lee 等[2009]的研究表明，湍流扩散对冠层动力学分馏效应也有贡献，所以在上式的分母中加入了冠层上方的空气动力学阻力项 r_a，公式变为：

$$\varepsilon_k^w = \frac{21r_b^w + 32r_c^w}{r_a + r_b^w + r_c^w}, \quad ‰ \tag{1.8}$$

$$\alpha_k = 1 + \frac{\varepsilon_k^w}{1000} \tag{1.9}$$

总同位素分馏效应为 $\alpha = \alpha_{eq}\alpha_k > 1$。

而 $^{18}O\text{-}CO_2$ 的冠层动力学分馏系数表示为，

$$\varepsilon_k^c = \frac{5.8r_b^c + 8.8r_c^c}{r_a + r_b^c + r_c^c}, \quad ‰ \tag{1.10}$$

$^{18}O\text{-}CO_2$ 的土壤动力学分馏系数表示为，

$$\varepsilon_{k,s}^c = \frac{8.8r_s^c}{r_a + r_{a,c} + r_s^c}, \quad ‰ \tag{1.11}$$

1.1.2 $^{18}O\text{-}H_2O$ 和 $^{18}O\text{-}CO_2$ 的观测方法进展

二十世纪三十年代，物理学家 *Alfred Nier* 制造出第一台同位素比质谱仪，并首次用于碳同位素比的测量[*Murphey and Nier*, 1941; *Nier*, 1947]。随后的 70 年内，稳定同位素理论和技术的持续发展，为广泛的研究地球系统过程提供了重要的工具[*Hoefs*, 2004]。

(1) $^{18}O\text{-}H_2O$ 的观测进展

1961 年，世界气象组织(WMO)和国际原子能机构(IAEA)建立的全球降水同位素观测网络(GNIP)开始运行(http://www-naweb.iaea.org/napc/ih/GNIP/IHS_GNIP.html)。目前已有 101 个国家的 800 多个气象站为 GNIP 收集降水样本，为研究降水同位素比的时间、气候和地理空间背景提供了不可或缺的资源。GNIP 的初衷是在全球范围内收集降水同位素含量的原始数据，确认降水中同位素的时空变化，从而，为水文学研究提供基础资料。近年来，为大气环流模式和气候变化研究提供资料也成为其目的之

一。全球变化与生态系统研究计划(GCTE)在北美建立了稳定性同位素观测网络(BASIN)。2002 年，在欧盟科学基金会的资助下，欧洲启动了另一项生物圈－大气气体交换稳定性同位素特征的研究计划(SIBAE)；全球陆地大气系统研究(GLASS)中的地表参数化方法对比计划(PILPS)也将同位素研究纳入其中(iPILPS)。

目前虽然有大量的凝聚态水同位素含量观测资料，但对水汽的观测却很少见。水汽的同位素数据能为水循环的提供一些研究液态水无法提供的重要信息。例如，*White* 和 *Gedzelman* [1984]和 *He* 等[2001]的研究显示美国东北部水汽的同位素含量与大气湿度密切相关，这表明水汽同位素含量携带了空气团的凝结史信息。*Jacob* 和 *Sonntag* [1991]在德国 Heidelberg 对水汽中同位素含量进行观测，发现水汽来源于本地降水。He 和 Smith[1999]的观测到边界层和自由大气之间水汽的同位素组成变化很大，HDO 变化幅度为 200‰，$H_2{}^{18}O$ 为 30‰。Smith [1992]用飞机对对流层上层的空气取样，并测量同位素比，发现冰放样是该处的水源之一。大多数对水汽同位素的研究的时间较短，而且采样不连续。Jacob 和 Sonntag[1991]对水汽同位素比进行了 8 年多近乎连续的观测，但时间精度较低，为 24－48 小时。

传统的水汽同位素观测通常包括采集和分析两个步骤，采集和分析的过程都费时费力，无法实现连续观测。第一步，用袋子收集水汽，然后用玻璃管冷阱[*Gat et al.*, 2003; *Jacob and Sonntag*, 1991; *Riley et al.*, 2003; *Wang and Yakir*, 2000]或带有金属球的金属罐，将水汽冷凝成液态收集起来[*Moreira et al.*, 1997]。取样装置的实际设计、温度和空气湿度都会影响采集效率，采集效率通常在 60% [*Yamanaka and Yonetani*, 1999]和 100% [*He and Smith*, 1999]之间。如果收集效率不理想，收集的水汽就会比环境水汽重，因为重同位素比更容易从气流中凝聚出来。第二步，用质谱仪分析水的同位素比。精度一般为 HDO 0.5-1‰，$H_2{}^{18}O$ 0.03- 0.1‰。水汽同位素的观测精度既受到分析仪器性能的影响，也受到采集过程的影响。

另外有两个研究组采用激光吸收光谱学进行水同位素研究。Kerstel 等[1999]采用 3μm 光谱区的单模色心激光器。他们将液态水样注入样品室，用参考室中已知同位素含量的标准样品对水样的吸收强度进行校正，得到同位素比。后来，他们制作了一个更加复杂的分析仪，性能有了很大提高[*Gianfrani et al.*, 2003; *Kerstel et al.*, 2002]。*Webster* 和 *Heymsfield* [2003]用飞机测量了平流层中层以下的水汽垂直廓线(混合比为 5ppm)，他们通过记录 6.7μm 波长区域的直接吸收和第二谐波光谱，得到同位素比的观测值。飞行中测量的校正参数采用 HITRAN 谱线参数表的测定振动转动谱参数，测量的不确定性为 20‰ ($H_2{}^{18}O$，飞行前校正)。

Lee 等[2005]研制了水汽同位素标定系统，与 Campbell Scientific 可调谐二极管激光(TDL)微量气体分析仪结合，对空气中水汽 $^{16}O/^{18}O$ 同位素比进行了实地、连续和高时间分辨率的测量。与上述研究手段不同的是，这一系统试图达到与质谱仪相当的精度，同时允许无干扰运行。这一技术的优点为：(1)避免了先取样后观测的方法可能造成的误差；(2)以往观测中，由于大气地表边界层中水汽同位素梯度量级与冷阱

方法观测精度的量级相同，所以容易造成误差，TDL 方法克服了这一问题；(3)与其他水同位素研究中采用的激光吸收光谱学方法不同，该系统能达到与质谱仪相匹配的精度。这种实时连续测量方法为水循环研究提供了新的出路，让我们能够从同位素的角度认识瞬时现象和较短时间尺度上发生的事情，如锋面、边界层阵风、边界层夹流，海陆风循环和降水中雨滴和雪花中的水汽同位素交换。同位素时间序列的观测也可能揭示出气团中水汽凝结和蒸发的微观变化。

2006年，中国科学院地理科学与资源研究所与美国耶鲁大学森林与环境学院稳定同位素研究组合作，在国际上第一台水汽$H_2{}^{18}O$、$HD^{16}O$ 和$H_2{}^{16}O$激光痕量气体分析仪(TGA100A, Campbell Scientific Inc., USA)的基础上构建了大气水汽$^{18}O/^{16}O$和D/H同位素比值和通量的原位连续观测系统，具备了大气水汽$^{18}O/^{16}O$和D/H同位素比值和通量的原位连续观测能力。以华北平原栾城冬小麦和夏玉米农田生态系统为研究对象辅以涡度相关系统和同位素质谱仪技术，在国内外率先开展农田生态系统水汽$^{18}O/^{16}O$和D/H 同位素比值和通量的原位连续观测的试验研究，重点实现农田生态系统SPAC水分运动的精细观测与过程解析[*Wen et al.*, 2008]。

(2) ^{13}C-CO_2 和 ^{18}O-CO_2 的观测进展

测量生物圈和大气圈的 ^{18}O-CO_2 传输对观测手段提出了巨大挑战，主要原因是缺乏快速响应分析仪器，无法满足生物－大气圈研究的精度要求。过去，人们采用驰豫涡旋积累法(REA)、EC/气瓶同位素通量法和通量梯度法[*Bowling et al.*, 1999; *Bowling et al.*, 2001; *Griffis et al.*, 2004; *Yakir and Wang*, 1996]。每种方法都有优缺点及逻辑上的局限性。而可调谐二级管激光谱和涡度相关法(EC-TDL)则使得直接观测 ^{18}O-CO_2 同位素通量成为可能[*Griffis et al.*, 2008]。

a) 驰豫涡旋积累法(REA)

REA 曾被用于测量森林 CO_2 传输的碳和氧同位素含量[*Bowling et al.*, 1999]。这一方法主要的技术挑战是需要用气瓶分别收集上升和下沉气流，用质谱仪测量，计算同位素含量差。在短期观测中，这一方法取得了一些成功，但是由于需要大量的气瓶和很长的分析时间，不适合长期观测。为了计算上升和下沉气流的标量混合比的微小差异，REA 需要相对较大的死区($\pm 0.8\sigma_w$)。*Baker*[2000]指出死区的应用通常可以减少 REA 通量的估计误差。然而，死区的应用使得该方法局限于较大涡度的测量。REA 方法需要大量的分析物，同时需要用涡度尺度进行同位素同化。死区也会直接影响 REA 的比例系数 β 的值及其物理解释。β 从联合高斯分布中推导出来，理论值约为 0.62 [*Baker*, 2000]，但实验研究表明不同的标量和采样阶段中 β 值是不同的[*Baker*, 2000; *Katul et al.*, 1996]。

b) EC/气瓶同位素通量法

EC/气瓶法是指用气瓶空气，每几分钟或每天收集一次，确定同位素比 δ_a^{13} 与 CO_2 混合比的关系，然后用 CO_2 混合比的高频率测量值，来估算 $^{13}CO_2$ 的高频(即 10Hz)变化[*Bowling et al.*, 1999; *Bowling et al.*, 2001]。$^{13}CO_2$ 估算值与垂直风速波动的协方差，即为 $^{13}CO_2$ 通量的估算值。EC/气瓶法局限性有：(1)无法确定不同时间尺度(几秒到几小时)上大气同位素含量变化的动态情况，这是该方法的主要局限性；(2)CO_2 混合比的观测时间间隔较短(i.e., 几分钟)，在 CO_2 混合比的有限变化范围内，传输方程的参数不确定；(3)浓度(气瓶数据)和通量(EC 数据)的印痕不匹配，在非均质地形下，这个问题尤为突出[*Griffis et al.*, 2007]；(4)只假设了两个端元，不适于计算 $C^{18}O^{16}O$ 通量[*Ogee et al.*, 2004]。

c) 通量梯度法

通量梯度法和 Monin-Obukhov 相似理论已经被用于研究农作物表面 CO_2 同位素传输和森林水汽同位素传输[*Griffis et al.*, 2004; *Lee et al.*, 2007; *Yakir and Wang*, 1996]。最近的研究表明，与 TDL 技术相结合，这一方法可以大大提高同位素通量观测的时间分辨率，但是白天农田和森林生态系统上梯度很小时，它的应用存在很大的挑战。过去几年中，采样方法得到了很大改善，有助于应对小梯度的问题。另外，这一方法的缺陷还包括：各个输入的足迹不匹配，逆梯度传输，将混合比梯度从粗糙底层局地垂直通量中解耦，源/汇分布不一致等等[*Kaimal and Finnigan*, 1994; *Raupach*, 1989]。

d) 可调谐二级管激光谱和涡度相关法(EC-TDL)

上述技术的局限性促使我们采用涡度相关(EC)方法来解决碳同位素传输问题。*Griffis* 等[2008]首次将闭路式可调谐二极管激光谱法与涡度相关方法相结合(EC-TDL)，测量 $C^{16}O_2$、$^{13}CO_2$ 和 $C^{18}O^{16}O$ 等同位素通量。该方法的优势主要有：第一，在较大尺度上测量生物圈－大气圈之间标量的传递，EC-TDL 的测量印痕更一致，比通量梯度或 EC/气瓶法好；第二，可以进行连续观测，时间精度比气瓶法高；第三，与其他小气候方法(如 REA、通量梯度发或 Monin-Obukhov 相似理论)相比，所需假设最少；第四，EC 方法可以用于冠层内部湍流交换过程的研究，而梯度方法却不行；第五，梯度法测量每种同位素含量要求 2 个进气口的数据无系统偏差，而测量同位素通量比时需要 4 个进气口，这对于野外试验来说难以实现，但是 EC 方法只需要一个进气口，这就减少了潜在误差。

1.1.3 生态系统 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 交换的理论进展

(1) 蒸发、蒸腾和叶片水的 ^{18}O-H_2O 含量计算

a) 蒸发水的 ^{18}O-H_2O 含量计算

蒸发会改变水的同位素含量，从而使得不同水体和通量具有不同的自然同位素信号[*Gat*, 1996]。在近地面，水汽的同位素含量受开放水体蒸发水、土壤蒸发水和植物蒸腾水的影响。开放水面蒸发水的同位素含量(δ_E)受以下因素控制：大气湿度、空气中水汽同位素含量、平衡分馏效应和动力分馏效应。计算 δ_E 的第一个理论模型是由 *Craig* 和 *Gordon*[1965]提出的。

$$\delta_E = [\alpha_{eq}\delta_L - h\delta_a - \varepsilon_{eq} - (1-h)\varepsilon_k]/[(1-h) + (1-h)\varepsilon_k/1000] \tag{1.12}$$

其中下标 *E*、*L* 和 *a* 分别表示蒸发水汽、液态水体和环境空气，*h* 为环境空气相对于水面温度的相对湿度。该式表明水汽中的 ^{18}O 含量比蒸发水体中的少。减少的程度取决于大气水汽同位素含量、相对湿度和水分子通过边界层扩散的分馏系数。

很多研究表明 Craig-Gordon 模型预测土壤水蒸发与试验结果吻合较好[*Allison and Barnes*, 1983; *Allison and Leaney*, 1982; *Barnes and Allison*, 1988; *Mathieu and Bariac*, 1996a; 1996b; *Walker and Brunel*, 1990; *Zimmermann et al.*, 1967; *Zimmermann et al.*, 1966]。

b) 蒸腾水的 ^{18}O-H_2O 含量计算

生态学家扩展了 Craig-Gordon 模型，研究陆地植物蒸腾的同位素组成(δ_T)[*Dongmann et al.*, 1974; *Farquhar and Cernusak*, 2005; *Flanagan et al.*, 1991]：

$$\delta_T = \frac{\delta_{L,e}/\alpha_e - h\delta_v - \varepsilon_{eq} - (1-h)\varepsilon_k}{(1-h) + (1-h)\varepsilon_k/1000} \tag{1.13}$$

其中 ε_k 和 ε_{eq} 是动力和平衡分馏系数，单位是‰。上式中有两个未知量 δ_T 和 $\delta_{L,e}$，自身不可解。过去，人们引入稳态假设使该模型闭合，即假设蒸腾水的同位素含量与水源（木质部水）的同位素含量相等。*Farquhar* 和 *Cernusak*[2005]提出将 $\delta_{L,e}$ 表示为叶片体积水 $\delta_{L,b}$ 值的函数，而 $\delta_{L,b}$ 可以观测或通过质量守恒方程计算得到。

c) Péclet 效应

采用 Craig-Gordon 模型计算作物蒸腾时，通常假设叶片很薄、水分充分混合，而且同位素含量均匀分布[*Farris and Strain*, 1978; *Forstel*, 1978]。由于蒸腾通量大于叶片体积水，通常假设叶片水总是与外界环境条件处于稳定状态，即 $\delta_{L,e}=\delta_{L,s}$。也就是说，稳态假设要求蒸腾水与木质部水具有相同的同位素含量，即 $\delta_T = \delta_x$。用 δ_x 代替上式中的 δ_T，便可以解 $\delta_{L,e}=\delta_{L,s}$，

$$\delta_{L,s} \approx \delta_x + \varepsilon_{eq} + \varepsilon_k + h(\delta_a - \varepsilon_k - \delta_x) \tag{1.14}$$

其中 h 是外界空气相对于叶片表面温度的相对湿度。此式的推导中忽略 $\varepsilon_k/1000$ 项。

越来越多的测量表明，Craig-Gordon 模型对叶片水同位素丰度的预测值偏高，不适合计算其空间分布[*Bariac et al.*, 1994; *Gan et al.*, 2002; *Helliker and Ehleringer*, 2000; *Wang and Yakir*, 1995]。这主要是由于两个复杂因素在起作用。首先，有证据表明，Craig-Gordon 模型预测的蒸发部位叶片水的同位素组成 $\delta_{L,s}$ 与 $\delta_{L,b}$ 不相等，原因是：叶片水被隔开，蒸腾对流与叶片水中 $H_2{}^{18}O$ 扩散方向相反，从而导致叶片中存在同位素梯度，即 Péclet 效应。正午时，蒸腾速率很大，Péclet 效应很重要。其次，日夜交替时(日出和日落前后)，由于环境条件迅速改变，导致预测的 $\delta_{L,s}$ 有很大误差。

为此，与 Craig-Gordon 模型相关的一些叶片水分同位素模型被开发出来。Two-pool 模型将叶片水描述为富集的叶片器官水和富集的维管水的综合[*Leaney et al.*, 1985]。Péclet 模型考虑平流和扩散作用的相对影响，计算叶片水丰度的“微观” 变化[*Farquhar and Lloyd*, 1993]。String-of-lakes 模型基于叶片水在蒸发路径上渐进的富集，预测整个叶片表面上的“宏观”空间变化[*Gat and Bowser*, 1991; *Helliker and Ehleringer*, 2000; , 2002b; 2002a]。

由于分馏效应，当蒸发点的 ^{18}O-H_2O 同位素富集时，H_2O^{18} 会从这些蒸发点扩散出去。而未发生同位素富集的叶脉水流入，使得叶片体积水的 $\delta^{18}O$ 比蒸发点的小。*Farquhar* 和 *Lloyd*[1993]以及 *Farquhar* 和 *Gan* [2003]认为叶片体积水 $\delta_{L,b}$ 与 $\delta_{L,e}$ 之间的关系为：

$$\delta_{L,b} = \frac{\delta_{L,e}(1-e^{-P})}{P} \tag{1.15}$$

其中 P 是片层径向 Péclet 数，定义为 EL/CD，E 为蒸腾速率(mol $m^{-2}s^{-1}$)， L 是折合有效波程长度(m)，C 是水的摩尔浓度(55.5×10^3 mol m^{-3})，D 是水中 $H_2{}^{18}O$ 的扩散率(2.66×10^{-9} m^2 s^{-1})。

通过蒸腾平流，$H_2{}^{18}O$ 分子在叶片中的扩散，未富集的木质部水与富集的叶片水混合，该模型抓住了这一混合的特征。Farquhar 等[2007]的数据为 Péclet 效应提供了

证据支持。在其他一些研究中，加入 Péclet 效应后，模拟的 $\delta_{L,b}$ 与实测值的吻合程度得到改进[*Barbour et al.*, 2004; *Cernusak et al.*, 2005; *Cernusak et al.*, 2002]。

d) 稳定/非稳定状态

稳态假设要求 $\delta_{L,bs}$ 恒定，然而研究者们逐渐发现，在野外条件下稳态假设通常不能满足。所以，人们对非稳态效应进行了一些模型和试验研究[*Dongmann et al.*, 1974; *Farquhar and Cernusak*, 2005; *Harwood et al.*, 1998; *Lee et al.*, 2007]。*Farquhar* 和 *Cernusak*[2005]扩展了 *Dongmann* 等[1974]的模型，考虑了 Péclet 效应，同时也考虑了叶片含水量的变化[*Yakir*, 1998]，非稳态理论公式如下：

$$\delta_{L,b} = \delta_{L,bs} - \frac{\alpha_k \alpha_{eq}}{g w_i} \cdot \frac{1-e^{-P}}{P} \cdot \frac{d(W \cdot \delta_{L,b})}{dt} \tag{1.16}$$

$$\delta_{L,e} = \delta_{L,es} - \frac{\alpha_k \alpha_{eq}}{g w_i} \cdot \frac{d(W \cdot \frac{1-e^{-P}}{P} \cdot \delta_{L,e})}{dt} \tag{1.17}$$

其中 $\delta_{L,b}$ 是实际的叶片体积水同位素丰度，$\delta_{L,bs}$ 是稳态值，W 是叶片含水量 (mol m^{-2})，α_{eq} 定义为 (1+(ε_{eq}(‰)/1000))，α_k 为(1+(ε_k(‰)/1000))，t 是时间(s)，g 为水汽的气孔导度和边界层的导度之和 (mol m^{-2} s^{-1})，w_i 是叶片胞间空隙中水气的摩尔分数(mol mol^{-1})。$\delta_{L,e}$ 和 $\delta_{L,es}$ 是蒸发点上同位素丰度的实际值和稳态值。

(2) ^{18}O-CO_2 通量计算

a) CO_2 与水的同位素平衡效应

在此将 CO_2 与水的同位素平衡程度表示为 θ_{eq}，θ_{eq} 在 0 到 1 之间取值，θ_{eq}＝1 表示完全平衡，即 CO_2 与水进行充分的 ^{18}O 交换。叶片和微生物中普遍存在碳酸酐酶，有了它的催化作用，CO_2 和水之间的 ^{18}O 交换几乎可以瞬间完成。通常认为，参与水合反应的水量是 CO_2 量的很多倍，所以不论其初始 $\delta^{18}O$ 是多少，同位素平衡的 CO_2 都会与水进行充分的同位素交换，氧同位素比相同。但是一些研究表明 $C^{18}OO$ 交换可能更为复杂，特别是 C_4 草场。例如，*Gillon* 和 *Yakir*[2001; 2000b]发现，大部分草的碳酸酐酶(CA)催化作用较低，无法达到完全的同位素平衡。不同光合作用途径对 $C^{18}OO$ 判别的差异可以帮助我们区分 C_3 和 C_4 植物对全球 CO_2 循环的贡献和影响，那么 θ_{eq} 的大小会影响大气的 $\delta^{18}O$-CO_2。θ_{eq} 的取值由两个因素之间的平衡所决定：(1)进入叶片的 CO_2 总量，(2)CO_2 与 H_2O 进行氧同位素交换位置的 CA 活性，这一平衡作用影响 CO_2 在叶片内的停留时间，从而影响每个 CO_2 分子参与水合反应的次数。

[*Gillon and Yakir*, 2000a]通过测量 CA 活性，得到大豆θ_{eq}值为 0.75-1.0。

Gillon 和 *Yakir*[2001]对不同品种叶片 CA 活性进行了测量，发现 C_4 作物的 CA 含量相对较低，其θ_{eq}值仅为 0.38，而 *Helliker*[2001]通过对 C_4 草 *Andropogon gerardii* 的测量，估算出叶片水平和整株作物的θ_{eq}值在 0.6 和 0.7 之间。另外，*Helliker* 和 *Ehleringer*[2000]报导了叶片水同位素含量沿着叶片长度方向变化很大，这使得草场呼吸作用 $C^{18}OO$ 交换变得更加复杂。*Cousins* 等[2006; 2008]发现用野外生长条件下观测的 $C^{18}OO$ 判别观测推导 θ_{eq}，比从叶片 CA 活性计算值低，而且随辐射强度产生变化。他们发现野外条件下，野生型 *Flaveria bidentis* 在低辐射条件下(PAR = 150 μmol m^{-2} s^{-1}) θ_{eq} 值为 1.06，高辐射条件下(PAR =2000 μmol m^{-2} s^{-1}) θ_{eq} 值为 0.45。他们认为叶片 CA 活性不能很好的预测 C_4 植物的 $\delta^{18}O$-CO_2 值。

b) 土壤呼吸的 ^{18}O-CO_2 通量计算

Francey 和 *Tans*[1987]以及 *Friedli* 等[1987]首次揭示了陆地总 CO_2 通量对计算 $\delta^{18}O$-CO_2 的重要性。为了计算土壤呼吸的 $\delta^{18}O$-CO_2，*Hesterbug* 和 *Siegenthaler*[1991]开发了模型，计算 CO_2 与土壤水的水合程度以及与土壤水的同位素平衡过程。他们同时强调扩散和平衡两个过程的竞争决定土壤呼吸 CO_2 的 $\delta^{18}O$ 值。*Tans*[1998]将该模型进一步延伸，加入了非生物“入侵”通量的影响，并得到了不同环境条件下土壤 $\delta^{18}O$-CO_2 和表面 CO_2 通量的解析解。*Miller* 等[1999]对 CO_2 从土壤扩散的有效动力学分馏系数进行了一系列详细的观测，揭示了土壤测量中入侵通量的重要性。*Stern* 等[2001]应用 *Tans*[1998]的解析解，对不同生态系统的土壤与大气之间的非生物 CO_2 交换进行了估算。

c) 光合作用 ^{18}O-CO_2 通量计算

Farquhar 等[1993]以及 *Farquhar* 和 *Lloyd*[1993]开发了计算光合作用 $C^{18}OO$ 交换的公式。与土壤呼吸类似，在叶片叶绿体内，CO_2 与水进行 ^{18}O 同位素交换。*Farquhar* 等[1993]认为，这些交换过程是进出气孔的 CO_2 通量以及叶绿体碳酸酐酶(CA)对水合反应的催化作用的函数。叶片 $C^{18}OO$ 交换受以下因素控制：CO_2 分子进入叶片的通量，与叶片水的同位素交换，以及反扩散作用(即，离开叶片的分子没有被光合作用固定，但是其 $\delta^{18}O$ 值发生变化)。另外有一些科学家对上述过程以及它们在光合作用中对 CO_2 通量 $\delta^{18}O$ 的影响进行了检验[*Flanagan et al.*, 1994; *Gillon and Yakir*, 2000a; *Gillon and Yakir*, 2000b; *Williams et al.*, 1996; *Yakir et al.*, 1994]。

(3) ^{18}O-CO_2 通量模型

在大气 CO_2 的 δ_a^c (‰)值的大尺度时空变化中，陆地生态系统碳循环占有主要份额。海洋气体交换、生物和化石燃料燃烧以及平流层化学反应等都影响 δ_a^c，但影响

程度较小[*Ciais et al.*, 1997b; *Farquhar et al.*, 1993; *Francey and Tans*, 1987; *Peylin et al.*, 1999]。全球尺度上，可以采用简单的质量守恒来估算这些通量的相对影响程度。净海洋交换、化石和生物燃料燃烧以及平流层化学反应各项均小于 150 Pg C yr^{-1} ‰，而光合作用和土壤呼吸通量约为 1000 Pg C yr^{-1} ‰ [*Farquhar et al.*, 1993; *Tans*, 1980]。*Francey* 和 *Tans*[1987]通过对全球数据分析后发现，陆地碳通量与土壤和叶片水的相互作用，导致南北半球之间的 δ_a^c 存在较大梯度。同时，*Friedli* 等[1987]在瑞士的研究发现 δ_a^c 的变化受到陆地通量的强烈影响。陆面过程模型可以将大气中 CO_2 和水汽的同位素组分 δ 的时空变化与陆地生物活动联系起来[*Ciais et al.*, 1997b; *Cuntz et al.*, 2003a; *Hoffmann et al.*, 2004; *McDowell et al.*, 2008; *Riley et al.*, 2002]。

a) 全球尺度 ^{18}O-CO_2 通量计算

在全球大气 CO_2 的 $\delta^{18}O$ 值模拟中，*Ciais* 等[1997b; 1997a]用陆面过程模型(SiB2)和离线示踪剂输运模型(TM2)，计算了全球植被和土壤 ^{18}O-CO_2 的表面通量、海洋大气的 ^{18}O-CO_2 交换、以及燃料排放和生物质燃烧的同位素特征。他们认为驱动大气 CO_2 的 $\delta^{18}O$ 季节变化的主要因子是陆地光合和呼吸作用，而海洋和人类活动影响很小。另外，陆地生物圈影响着大气 $\delta^{18}O$ 的纬度梯度，这进一步验证了 *Francey* 和 *Tans*[1987]及 *Farquhar* 等[1993]的结论。使用相同的模型组合，*Peylin* 等[1999]研究了某些地理区域对 $\delta^{18}O$-CO_2 时间和纬度变化的影响。他们认为，高纬地区大气 $\delta^{18}O$-CO_2 的季节变化主要是温带生物呼吸作用的函数，西伯利亚泰加林的碳交换对北半球在北半球 $\delta^{18}O$-CO_2 的季节变化起主导作用，因为那里的土壤和叶片水 ^{18}O 均很低。*Cuntz* 等[2003a; 2003b]首次建立了计算大气 $\delta^{18}O$-CO_2 的全球三维综合模型。模拟 CO_2、$\delta^{18}O$-H_2O 和 $\delta^{18}O$-CO_2 的日变化和传输。

b) 生态系统 ^{18}O-CO_2 通量计算

一些生态系统尺度的研究已经报道，用 H_2O 和 CO_2 的 ^{18}O 测量值，有助于更好的认识控制与大气交换 CO_2 的 $\delta^{18}O$ 值的因素，将已测量的净 CO_2 通量与总通量区分开[*Dawson et al.*, 2002; *Yakir and Sternberg*, 2000]。*Yakir* 和 *Wang*[1996]利用光合作用和土壤呼吸的同位素差异，在一些作物田中，用 ^{18}O 和 ^{13}C 的同步测量值将净 CO_2 通量的土壤和植物组分分离。*Flanagan* 和 *Varney*[1995]在松树冠层内两个高度测量了水体和 CO_2 的 ^{18}O 含量，混合模型对 $C^{18}OO$ 含量日变化的预测结果与冠层内观测值一致。基于土壤、茎和叶片水 ^{18}O 的测量值，*Flanagan* 等[1997]分析了光合和呼吸作用的碳交换对森林冠层上的 $\delta^{18}O$-CO_2 测量值的影响，其中 $\delta^{18}O$-CO_2 的变化与光合作用 $C^{18}OO$ 通量的变化密切相关，光合作用 $C^{18}OO$ 的正午判别相近，但因为与广阔苔藓层之间的相互作用，土壤呼吸放出的 CO_2 同位素含量低于期望值。在热带森林站点，*Harwood* 等[1998]报道了叶片尺度上 CO_2 通量的 $\delta^{18}O$ 测量值，并分析了与水汽压亏

缺和气孔导度之间的关系。*Harwood* 等[1999]在 UK 森林站点上采用了 Keeling 曲线分析，检验了植物和土壤水体与观测 $\delta^{18}O$-CO_2 的关系，发现生态系统水体的非均质性可能造成了 CO_2 通量 $\delta^{18}O$ 的变化。*Wang* 和 *Yakir* [2000]用 Keeling 图和生态系统水体 ^{18}O 的测量值，计算了净生态系统潜热通量中土壤和叶片的贡献。

Riley 等[2003; 2002]建立了同位素模型(ISOLSM)模拟冠层水汽、叶片水和土壤水的 ^{18}O 含量，叶片光合作用 $C^{18}OO$ 通量，CO_2 与土壤水和叶片水进行的同位素交换，土壤 CO_2 和 $C^{18}OO$ 扩散通量，以及生态系统与大气之间的 $H_2{}^{18}O$ 和 $C^{18}OO$ 交换。结果发现土壤和叶片中碳脱水酶活性和大气中 $\delta^{18}O$-H_2O、$\delta^{18}O$-CO_2 对生态系统 CO_2 通量的同位素组分有很大影响。

McDowell 等[2008]用可调谐二极管激光光谱仪(Campbell Scientific's TGA100)对夜间生态系统呼吸 CO_2 的同位素含量进行了连续两年的观测，然后对三个模型进行了评价：即 CanIsotope (canopy-isotope)模拟 $\delta^{13}C_R$，SIM (simple isotope model) 模拟 $\delta^{18}O_R$，和 ISOLSM (isotope land surface model) 模拟 $\delta^{13}C_R$ 和 $\delta^{18}O_R$。结果显示对生态系统和大气 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 的精确模拟很重要，但是模型需要高精度连续的数据进行验证。

全球及冠层尺度的研究表明，$\delta^{18}O$-CO_2 是总陆地碳循环的敏感指示剂。但是，CO_2 与土壤和植物水进行 ^{18}O 交换的过程机理复杂，时空变化大，与气象因子、植被类型和植被状态有关(如，C_3 和 C_4 光合途径，叶面积指数(LAI))。例如，C_3 草叶片的胞间 CO_2 浓度(C_i)通常比 C_4 叶片高。CO_2 通过叶片边界层和气孔的有效分馏系数取决于 C_i，所以 c_i 会影响生态系统 CO_2 通量的同位素含量。另外，C_3 和 C_4 作物对生态系统能量物质平衡的影响不同[*Baldocchi*, 1994]。

1.2 研究动机

陆面过程模型(LSMs)能有效地结合陆地生态系统 CO_2 和 H_2O 交换的同位素分馏过程。*Cuntz* 等[2003a; 2003b]和 *Hoffmann* 等[2004]用 LSMs 模拟全球尺度上 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 收支。*Farquhar* 等[1993]用气象因子观测值计算了全球 ^{18}O-CO_2 组分来研究氧分馏机制，发现陆地通量和海洋通量对大气 ^{18}O-CO_2 含量有不同影响，而不同生物也有不同影响。*Gillon and Yakir* [2001]用 SiB2 模型计算了 CO_2 与叶片水的 ^{18}O 平衡程度，估算出全球平均值为 0.8，而不同种群和 C_3 与 C_4 植物的碳脱水酶活性有很大差异。*Riley* 等[2003; 2002] 开发了同位素模型模拟生态系统尺度的 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 交换。但是由于缺乏野外条件下高分辨率的同位素数据，^{18}O-CO_2 通量的 LSMs 的验证受到限制[*McDowell et al.*, 2008]。有关同位素交换的一些理论在冠层尺度上无法得到验证（如叶片水同位素含量的非稳态效应、叶片 CO_2 水合程度取值和冠层尺度动力学分馏系数等），从而阻碍了同位素交换机制的理论研究。

近年来，可调谐二极管激光(TDL)波谱学技术的发展，无疑提高了我们获取高时

空分辨率的同位素含量和通量数据的能力[*Bowling et al.*, 2003a; *Griffis et al.*, 2004; *Griffis et al.*, 2008; *Lee et al.*, 2007; *Lee et al.*, 2005]。耶鲁大学生物气象学研究组和明尼苏达大学生物气象学研究组合作，于 2006 年首次应用 TDL 技术对生态系统尺度上 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 含量和通量进行的同步连续观测，并且进行了完整的配套观测，包括水、热和 CO_2 通量，小气候因子，生态系统水体 ^{18}O-H_2O 含量等，使得通过建立模型验证目前理论认识成为可能[*Griffis et al.*, 2008; *Lee et al.*, 2009; *Welp et al.*, 2008]。

1.3 研究目标、创新点和内容

1.3.1 研究目标

本文的目标为建立一个简单同位素陆面过程模型(SiLSM)，结合有关控制同位素交换的分馏过程的最新试验结果和理论知识。用各个主要同位素因子的高时间分辨率测量值，对同位素 LSM 进行驱动和检验，这也是本文的第一个特点。这些数据是在野外试验中观测获得的，用涡度相关和通量梯度方法测量 ^{18}O-CO_2 和 ^{18}O-H_2O 同位素通量、生态系统水体的 ^{18}O-H_2O 含量、大气 CO_2 的 $^{18}O/^{16}O$ 比以及小气候因子[*Griffis et al.*, 2005b; *Griffis et al.*, 2008; *Lee et al.*, 2005; *Welp et al.*, 2008]。

SiLSM 采用 *Farquhar* 和 *Cernusak* [2005]的公式模拟非稳态条件下叶片水的 ^{18}O-H_2O 含量($\delta_{L,e}$)。由于$\delta_{L,e}$对于计算生态系统向大气的 ^{18}O-CO_2 通量是很重要的，所以$\delta_{L,e}$的模拟是同位素 LSMs 的一个关键部分[*Farquhar et al.*, 1993]。若研究者希望将经 CO_2 通量分成总光合作用和呼吸作用两个组分[*Ogee et al.*, 2004; *Yakir and Wang*, 1996]、用植物物质重组古气候[*Cullen et al.*, 2008; *Epstein and Yapp*, 1977; *Gray and P*, 1976; *Libby et al.*, 1976; *Roden et al.*, 2000]、以及估算 Dole 效应[*Bender et al.*, 1994; *Hoffmann et al.*, 2004]等，进一步认识$\delta_{L,e}$以及相关的冠层 ^{18}O-CO_2 通量会有所帮助。*Dongmann et al.* [1974]首次采用 *Craig and Gordon* [1965]开发的公式计算了非稳态条件下的叶片水同位素组分。*Farquhar and Cernusak* [2005]的研究考虑了非稳态效应[*Wang and Yakir*, 1995]和 Péclet 效应产生的 ^{18}O 从木质部向蒸发点的渐进富集[*Farquhar and Lloyd*, 1993]。对冠层蒸腾同位素含量的实地观测[*Welp et al.*, 2008]和叶片体积水δ的高分辨率测量[*Farquhar and Cernusak*, 2005]都显示出野外条件下考虑非稳态效应和 Péclet 效应的重要性。*Farquhar and Cernusak* [2005]公式的初始设置是叶片尺度，这里我们将这一概念扩展到冠层尺度。

动力学分馏作用是控制生态系统和大气之间同位素交换的另一个关键因子。在叶片尺度研究中，动力学分馏作用是气孔阻力和叶片边界层阻力构成的动力学系数的函数[*Dongmann et al.*, 1974; *Farquhar and Lloyd*, 1993; *Flanagan et al.*, 1991]。而在冠层尺度上，湍流扩散在动力学分馏作用中的作用并未得到较好的认识，没有统一的处理

方法[*Ciais et al.*, 1997b; *Cuntz et al.*, 2003a; *Dongmann et al.*, 1974; *Farquhar et al.*, 1993; *Hoffmann et al.*, 2004; *Riley et al.*, 2002]。首次进行的同位素通量直接测量，确认了在 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力和叶片水 ^{18}O 含量计算中考虑空气湍流扩散的必要性[*Lee et al.*, 2009]。本文中，SiLSM 结合了 *Lee* 等[2009]开发的冠层尺度分馏系数和大叶同位素驱动力参数化方案。

本文的另一个研究目标是对模型进行敏感性分析，确认同位素 LSM 参数化误差的潜在原因，以及控制同位素通量的因子。特别地，我们将着重研究以下三个问题：(1)能量平衡闭合对模型研究的重要性，调整涡度相关观测数据和强迫能量平衡闭合的必要性；(2)冠层 ^{18}O-CO_2 交换对叶片内 CO_2 水合程度的敏感性；(3) CO_2 浓度、风速和温度如何影响生态系统对大气中同位素含量的贡献。

1.3.2 研究创新点

本论文主要有三个创新点：第一，将非稳态条件下叶片水 ^{18}O-H_2O 含量的计算公式(*Farquhar & Cernusak*. 2005)应用到冠层尺度的研究，并与同位素 LSM 模型嵌套，进行整个生长季的研究；第二，在 LSM 中采用冠层尺度动力学分馏系数(考虑了空气湍流扩散的作用，*Lee et al*. 2009)；第三，采用 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 含量和通量的一整套高分辨率的观测数据，对同位素 LSM 进行验证。

1.3.3 论文内容

本文第二章将介绍试验站点和观测方法。第三章介绍模型的结构、理论和参数化方法。第四章描述模型输入变量的观测数据。第五章为模型结果：对水热和 CO_2 通量、叶片水 $\delta^{18}O$、蒸腾水 $\delta^{18}O$ 和 ^{18}O-CO_2 同位素通量的模拟。第六章为敏感性分析，分析能量平衡闭合性、非稳态效应、CO_2 水合程度、空气湍流扩散、CO_2 浓度升高等对 ^{18}O-CO_2 同位素通量计算的影响。第七章为讨论和结论部分。附录 1 为 SiLSM 模型符号表。附录 2 介绍本文所采用的同位素观测方法。

第二章 试验站点和观测方法

2.1 试验站点

试验在 University of Minnesota Rosemount Research and Outreach Center(北纬 44°42′51.5″，西经 93°05′23.4″，海拔 259 m)进行，位于美国明尼苏达州 St. Paul 市以南约 25 km。第四纪后期，该区域是冰川冲积平原，后来被黄土覆盖，在 0.5-1.8m 形成粉质壤土，以下 20 m 是砂砾。该站点均匀平坦，小气候塔的周围各方向的风浪区均为 200m 以上。自 120 多年前开始，人们就开始对这片农田进行集约化耕作。而在此之前，这里是旱地草场(C_3 和 C_4 品种)(Marschner1974)，如须芒草(Andropogon gerardii Vitman)和印度草(Sorghstrum nutans)。根据资料记载(Minnesota State Agricultural Census Data, Dakota County Historical Society)，自 1879 年，这里开始种植小麦(C_3 光合途径)。1998－2001 年，种植玉米(*Zea mays L.*, C_4 光合途径)，2002 年种植大豆(*Glycine max*, C_3 光合途径)，2003 年种植玉米，从此进行大豆/玉米轮作。秋耕采用凿形犁结合双列圆盘，春耕前施肥，无灌溉。对土壤有机质的碳同位素分析表明，地面至 0.45m 深的土壤有机质混合均匀，碳同位素含量为-18‰ [*Griffis et al.*, 2005a]。

图 2.1 试验场地及周围景观航片

Figure 2.1 Air photo of the research study site and surrounding heterogeneous landscape

白色粗虚线为试验田，其中实心点是小气候塔位置，距离田边大约 200m。航片为自然色调，分辨率为 1m，取自明尼苏达自然资源部农业管理委员会(FSA)2003－2004DOQs 的原始未压缩 TIFF 正摄影像。The field site is outlined using a thick dashed white line with the solid circle designating the position of the micrometeorological tower. The tower is located approximately 200m from the edge of the field. The air photo is 1 –m resolution, natural color imagery derived from the original uncompressed TIFF quarter-quad orthophoto, Farm Services Administration (FSA) 2003-2004 DOQS, Minnesota Deparment of Natural Resource

试验场地及周围景观见图 2.1。从小气候角度看，该站点较均匀，虽然周围景观较复杂，但对于通量梯度和浓度/通量印痕等方面的研究，是个理想的场所。

本文涉及的试验于 2006 年大豆生长季完成，5 月 24 日(日序 DOY 144)播种，10 月 10 日(DOY 283)收获。8 月 3 日(DOY 215)叶面积指数 LAI 达到最大值 8.15，此时冠层高度为 0.93m (最大值为 1.05m)。2006 年生长季气候状况如下表所示[*Welp et al.*, 2008]：

表 2.1 月平均气候状况

Table 2.1 Monthly climate condition

月份	气温	降水	H_2O 混合比	RH	土壤湿度(VWC)			结露
	°C	mm	(mmol mol^{-1})	(%)	5cm	10cm	25cm	(% of night)
5 月	15.7	47.2		(58)	0.25	0.32	0.38	N/A(84)
6 月	20.6	48.6	15.5	64	0.21	0.27	0.35	60(80)
7 月	24.3	64.7	21.0	67	0.21	0.26	0.32	81(77)
8 月	20.7	145.6	19.7	80	0.23	0.28	0.35	84(81)
9 月	14.4	73.3	13.7	78	0.26	0.31	0.35	54(65)

2.2 同位素观测

2006 年大豆生长季内，有三个可调谐二极管激光(TDL)分析仪(型号 TGA100, Campbell Scientific, Inc., Logan, Utah)同步运行，测量 CO_2 和水汽的同位素含量。其中一个分析仪被用于测量两个冠层高度上的水汽同位素含量(δ_v)，用通量梯度法计算蒸散的 $^{18}O/^{16}O$ 同位素比[*Welp et al.*, 2008]。第二个 TDL 分析仪也是采用通量梯度模式，在冠层两个高度上测量大气 CO_2 的 $^{18}O/^{16}O$ 和 $^{13}C/^{12}C$ 同位素比。自 2006 年 6 月 18 日至 9 月 20 日，安装了第三个 TDL 分析仪，采用闭路式涡度相关(EC-TDL)模式测量协方差 $\overline{w'\delta'}$ ，直接测量 $C^{18}O^{16}O$ 同位素驱动力 [*Griffis et al.*, 2008]。TDL 分析仪被安装在农田北部边缘，因此对风向很敏感，北风时段的数据应该剔除，而风向为 90－270 度的数据为较好风浪区。大气水汽和 CO_2 的 $^{18}O/^{16}O$ 比将被用作 SiLSM 的驱动因子，而 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力和 δ_E 的观测值会被用来评价模型性能。详细的观测理论和方法见附录 2。

我们剔除了风浪区不好、降水和测量不稳定等时段的 δ_E 数据。过滤 δ_E 数据后，整个生长季节的有效数据小时数占 37%，每个月有效数据时段分别为：6 月 30%，7 月 45%，8 月 42%，9 月 32%。由于采样管的衰减效应，激光 EC 系统测量的 CO_2 通量比开路式涡度相关系统低，因此本文中将 EC-TDL 测量的 ^{18}O-CO_2 通量值提高 10%。

另外，模型的驱动还需要叶片含水量和生态系统水体(包括土壤水、茎杆水和叶

片水)的 ^{18}O-H_2O 含量作为输入因子。为测量叶片含水量和叶片水的 $\delta^{18}O$ 值，每天正午采集叶片，去除中心叶脉，每次从至少 4 株上取冠层上部约 4 片大叶，冠层下部约 9 片小叶。同时，每周收集茎杆和 10cm 深处土壤，每次降水时收集雨水，定期取地下水。从 7 月 27 日到 30 日(加密观测阶段)，每 3 小时采集一次叶片样品，每 6 小时采集茎杆和土壤(0、5 和 10cm 深)样品，每天采集一次 20cm 深土壤。植物和土壤样品用玻璃瓶密封并冷冻，带回耶鲁大学后，用真空管系统提取水，再用 GasBenchII 自动采样器和 Delta Plus XL 同位素比质谱仪(Thermo Finnigan, Bremen, Germany)测量提取出的植物水和重力水的 $\delta^{18}O$ 含量(精度＝0.2%)，该仪器的工作原理是 CO_2 平衡方法。

2.3 通量和小气候观测

如上图所示小气候观测塔高 10 米，编号为 G21，位于农田中心，各向风浪区为 200m 左右。塔上装有三维声波风速计(CSAT 3, Campbell Scientific Inc., Logan, UT)和开路式红外气体分析仪(LI7500, LiCor, Lincoln, NE)，根据冠层高度变化调整其位置。用总辐射表和地球辐射表(Eppley Laboratories, Newport, RI)分别测量太阳辐射和长波辐射，然后计算净辐射。对朝上的仪器通风，以降低结露和降水的影响。在 10cm 深处安装一组热通量盘(Hukseflux, the Netherlands and REBS, Seattle, WA)测量土壤热通量，并在其上方土壤中放置温差电偶，计算地表的热量贡献。用自动时域反射计(TDR 100, Campbell Scientific, Logan, UT)测量土壤湿度。另外，2006 年大豆生长季，土壤含水量的测量深度为 5、10 和 25cm。所有土壤和辐射因子的测量频率为 30s 或 60s，然后计算成 30 分钟平均。涡度相关仪器的频率为 10Hz，而每 30 分钟计算协方差。固定时间间隔对开路式气体分析仪进行校准。用标准气体设定 CO_2 取值范围，用露点仪设定 H_2O 的取值范围，用高氯酸镁和碱石灰过滤气体生成零气。

采集数据后，先进行二维坐标旋转，再用垂直风速、温度和水汽密度测量值计算感热和潜热通量。同时用 Webb 等(1980)的密度校正和 Schotanus 等(1983)的声波温度求解来求解方程。在已经对侧向混合情况下的瞬时温度测量值进行校正的情况下，对声波温度的求解方程进行了调整。然后，用感热通量、潜热通量、垂直风速与二氧化碳浓度的平均协方差计算密度校正的 F_N。

小气候通量数据不可避免地有数据遗失或可疑数据。遗失数据的问题比较容易解决。停电、仪器故障、仪器维护或田间作业等会引起数据缺测，由于数据空缺，很容易被发现，通常直接找出数据空缺，或用数据插补程序能识别的特定数据代替(Falge et al., 2001)。可疑数据的处理就复杂得多，要求筛选程序既能剔除野点子，又能将有效数据的损失降到最低。本文研究时段内，净辐射、空气温度、湿度、土壤温度、冠层温度和风速的有效数据为 90%，土壤湿度的有效数据为 88%，缺测数据用相邻试验田观测塔 G19 的数据填补。

Baker 和 *Griffis*[2005]发现反常数据通常出现在湍流较弱、有降水或凝结(结露或霜冻)时。所以，将摩擦风速 u^*小于 0.1m s^{-1} 或相对湿度超过 98%的数据全部剔除。其中 u^*的最小边界值比森林冠层中使用的边界值小(如 Barr 等，2002)。本文中所用潜热通量、感热通量和 F_N 观测值的有效数据为 93%。采用常规程序进行数据插补，从而估算年度 F_N。用整理过的光合作用通量与相应的 PAR 测量值计算各生长季的 Michaelis-Menten 系数，计算窗口为 2 到 5 天。然后，用该系数估算遗失的半小时 F_N 数值。对于 F_N 为正值(呼吸作用)的情况，采用对 5cm 土壤温度的多项式回归来填补遗失数据。

第三章 模型描述

3.1 模型结构

SiLSM 模型由三个主要部分组成：(1)大叶 LSM 子模型[*Ronda et al.*, 2001]；(2)^{18}O-H_2O 子模型：*Farquhar* 和 *Cernusak*[2005]开发的非稳定状态下的叶片水 ^{18}O-H_2O 含量计算公式；(3) ^{18}O-CO_2 子模型：大气 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力大叶参数化方案[*Lee et al.*, 2009]。SiLSM 模型的步长为半小时；驱动因子为植物因子、微气象因子和大气及生态系统水体 H_2O 和 CO_2 的 ^{18}O 含量；输出变量为叶片体积水和蒸腾水 ^{18}O-H_2O 的 δ 值 $\delta_{L,b}$ 和 δ_E，以及生态系统动力学 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力(Isoforcing) $\overline{w'\delta'}$。

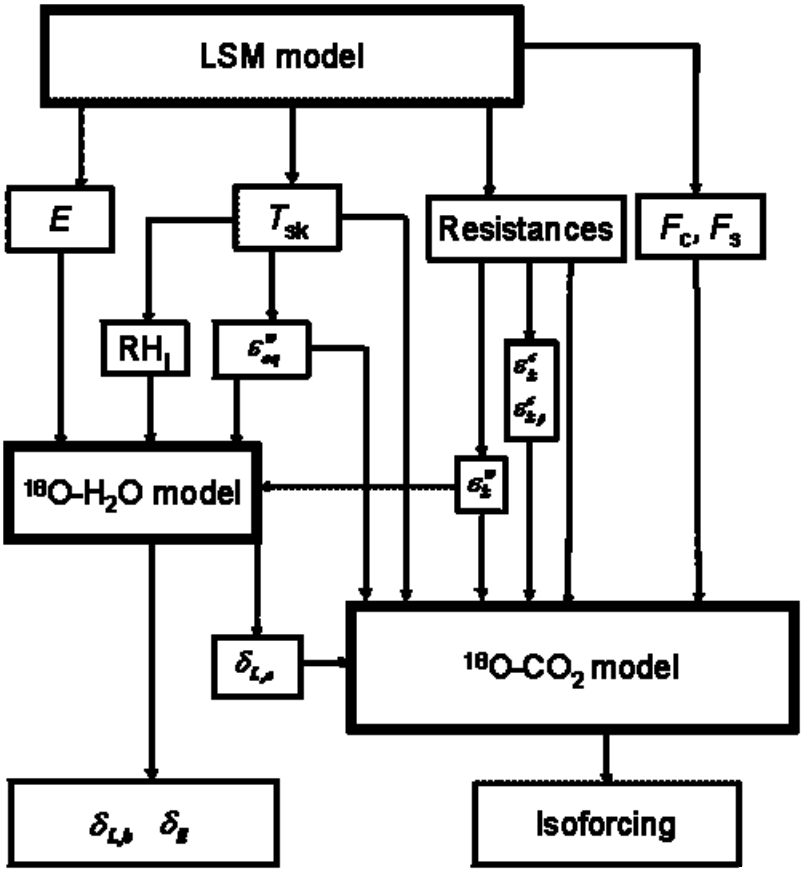


图 3.1 模型结构图

Figure 3.1 Model structure

各子模型关系如图 3.1 所示：LSM 子模型以常规观测的气象因子和植物因子为输入变量，计算另外两个模型所需的一些中间变量，即水热和 CO_2 通量、冠层温度、阻力项及分馏系数等；^{18}O-H_2O 子模型计算叶片蒸发点上 ^{18}O-H_2O 含量 $\delta_{L,e}$，作为 ^{18}O-CO_2 子模型的输入变量；而 ^{18}O-CO_2 子模型计算 SiLSM 的最终输出变量，即 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力。各子模型的输入和输出变量具体见表 3.1。

表 3.1 输入变量描述

Table 3.1 Description of input variables

输入变量		意义	单位	LSM 子模型	^{18}O-H_2O 子模型	^{18}O-CO_2 子模型
植物因子	LAI	叶面积指数	–	✓		
	h	冠层高度	m	✓		
	LWC	叶片含水量	g m^{-2}	✓	✓	
微气象因子	T_a	参考高度上空气温度	K	✓		
	T_s	5cm土壤温度	C	✓		
	RH	参考高度上空气的相对湿度	%	✓	✓	
	θ	5cm 深处土壤湿度	VWC	✓		
	R_S	入射短波辐射通量密度	W m^{-2}	✓		
	R_L	入射长波辐射通量密度	W m^{-2}	✓		
	C_a	参考高度z_m处的CO_2摩尔浓度	μmol m^{-3}	✓		✓
	u_m	参考高度上风速	m s^{-1}	✓		
	u*	摩擦速度	m s^{-1}	✓		
$\delta^{18}O$	δ_v	参考高度上大气 ^{18}O-H_2O 的 δ 值	‰		✓	
	δ_x	木质部水的 ^{18}O-H_2O 的 δ 值	‰		✓	
	δ_a	参考高度上大气^{18}O-CO_2的δ值	‰			✓
	δ_s	10cm 深土壤水 ^{18}O-H_2O 的 δ 值	‰			✓

LSM 子模型的输入变量包括叶面积指数 LAI、冠层高度 h、叶片含水量 LWC、参考高度上空气温度 T_a、相对湿度 RH、风速 u_m、摩擦速度 u*、大气 CO_2 摩尔浓度 C_a、入射长短波辐射通量密度 R_L 和 R_S，以及 5cm 土壤温度 T_s 和土壤湿度 θ（表 3.1）；输出变量为蒸腾速率 E、冠层温度 T_{sk}、阻力项（冠层顶以上的空气动力学阻力 r_a、冠层内空气层的空气动力学阻力 $r_{a,c}$、CO_2 的边界层阻力 r_b^c、冠层对 CO_2 的阻力 r_c^c、边界层对 H_2O 的阻力 r_b^w、冠层对 H_2O 的阻力 r_c^w）、冠层和土壤 CO_2 通量 F_c 和 F_s。T_{sk} 用以计算外界空气相对于冠层温度的相对湿度 RH_i 和气态水和液态水之间的平衡分馏系数 ε_{eq}^w。阻力项用于计算 ^{18}O-H_2O 冠层动力学分馏系数 ε_k^w、^{18}O-CO_2 的冠层和土壤动力学分馏系数 ε_k^c 和 $\varepsilon_{k,s}^c$。

^{18}O-H_2O 子模型的输入变量为 LWC、RH、参考高度上大气 ^{18}O-H_2O 的 δ 值 δ_v 和木质部水的 ^{18}O-H_2O 的 δ 值 δ_x。输出变量为叶片体积水蒸腾水和叶片蒸发点 ^{18}O-H_2O 的 δ 值 $\delta_{L,b}$、δ_E 和 $\delta_{L,e}$，其中前两项作为模型的输出变量，与观测值进行比较；$\delta_{L,e}$ 作为 ^{18}O-CO_2 模型的输入变量，该项无法从实际测量中获得。

^{18}O-CO_2 子模型的输入因子为参考高度 z_m 处大气 ^{18}O-CO_2 的 δ 值 δ_a^c、大气的 CO_2

含量 C_a 和土壤中空气的的 $^{18}O\text{-}CO_2$ 的 δ 值 δ_s^c (由土壤水 $^{18}O\text{-}H_2O$ 的 δ 值 δ_s 计算得到)。结合 LSM 模型和 $^{18}O\text{-}H_2O$ 模型的输出变量 F_c、F_s、ε_k^w、ε_k^c、$\varepsilon_{k,s}^c$、$\delta_{L,e}$ 以及阻力项，计算生态系统动力学同位素驱动力(Isoforcing) $\overline{w'\delta'}$。

3.2 理论

3.2.1 水、热和 CO_2 通量

选择该 LSM 的原因是：第一，它是大叶模型，能很容易地与 *Farquhar- Cernusak* 模型的大叶模式以及 *Lee* 等[2009]开发的同位素驱动力大叶参数化方式相结合；第二，*Huang* 等[2009]最近将该 LSM 与 NCAR 的大涡模拟模型(LES)相结合，并致力于扩展 LES 模型的功能，模拟大气边界层碳和水同位素收支；最后，该 LSM 考虑了植物生理对冠层内光投射的非线性响应，这在其他大叶 LSMs 中通常被忽略。与 *Riley et al.* [2002]的阴阳叶双叶模型和 *Baldocchi and Bowling* [2003]以及 *Ogée et al.* [2007]的多层模型相比，该模型对这种响应的处理是粗糙的。但是，选择简单的 LSM 是合理的，因为我们没有冠层内小气候观测数据来检验这些复杂模型的模拟。

在该 LSM 中，采用体积交换关系来计算感热和潜热通量密度[*Beljaars and Holtslag*, 1991]。地表能量收支方程为

$$(1-\alpha)R_S + \varepsilon R_L - \varepsilon\sigma T_{sk}^4 = H + LE + G \tag{3.1}$$

其中 R_S 和 R_L 分别是入射短波和长波辐射通量，H 是感热通量密度，LE 为潜热通量密度，G 为土壤热通量密度，ε 为地表辐射率，α 为地表反射率，σ 为 Stefan-Boltzmann 常数。T_{sk} 为表面温度。

通常，用整体输送关系计算感热通量和潜热通量密度。典型的方法是将通量密度和表层廓线建立关系[*Beljaars and Holtslag*, 1991]，即，

$$H = \rho_a c_p g_a \left(T_{sk} - T_a\right) \tag{3.2}$$

$$LE = \rho_a \lambda g_a \frac{q^*(T_{sk}) - q_a}{1 + g_a / g_c^w} \tag{3.3}$$

其中 ρ_a 是空气密度，c_p 是等压比热，g_a 为空气动力学导度，g_c^w 为冠层对水汽传输的阻力，T_a 为参考高度 z_m 上的气温，λ 为蒸发潜热，$q^*(T_{sk})$为冠层表面的饱和比湿，q_a 为参考高度上的饱和比湿。

采用植物生理学方法计算 CO_2 通量密度，是总同化速率与暗呼吸之差，

$$A_n = g_{l,c}(C_a - C_i) = A_g - R_d \tag{3.4}$$

其中，A_n 为进入植物的净 CO_2 流量，C_a 为叶面 CO_2 浓度，C_i 为胞间 CO_2 浓度，A_g 为

总同化速率，R_d 为暗呼吸速率。此处，A_g 和 R_d 是光化学反应的产物，它们是光合有效辐射、叶面温度和胞间 CO_2 浓度的函数。*PAR* 是吸收入射短波辐射的 50%。A_g 和 R_d 的植物生理学模型为[*Collatz et al.*, 1991; *Collatz et al.*, 1992]，

$$A_g = f(PAR, T_{sk}, C_i) \tag{3.5}$$

我们采用[*Jacobs*, 1994]的计算方法

$$A_g = (A_m + R_d)\{1 - e^{-[\alpha PAR/(A_m + R_d)]}\} \tag{3.6}$$

$$A_m = A_{m,\max}\{1 - e^{-[g_m(C_i - \Gamma)/A_{m,\max}]}\} \tag{3.7}$$

$$\alpha = \alpha_0 \frac{C_s - \Gamma}{C_s + 2\Gamma} \tag{3.8}$$

其中，α 为光能利用率，α_0 为初始光能利用率(低光强条件下)，g_m 为叶肉导度，$A_{m,max}$ 为高光强和高 CO_2 浓度下的最大初级生产力，Γ 为 CO_2 补偿点。

Collatz 等[1991; 1992]对 α_0 的取值进行了推导，本文取值为 0.017 mg J^{-1}。g_m、$A_{m,max}$ 和 Γ 等参数是叶温的函数，

$$\Gamma(T_{sk}) = \Gamma(T_{sk} = 298)Q_{10}^{(T_{sk} - 298)/10} \tag{3.9}$$

其中 Γ (T_{sk} = 298)和 Q_{10} 的取值为 68.5 ρ_a mg m^{-3} 和 2.0（见附录 1），g_m 和 $A_{m,max}$ 计算公式为[*Collatz et al.*, 1991; *Collatz et al.*, 1992; *Jacobs*, 1994]，

$$X(T_{sk}) = \frac{X(T_{sk} = 298)Q_{10}^{(T_{sk} - 298)/10}}{[1 + e^{0.3(T_1 - T_{sk})}][1 + e^{0.3(T_{sk} - T_2)}]} \tag{3.10}$$

其中 X 分别为 g_m 和 $A_{m,max}$，参数取值见附录 1。

暗呼吸 R_d 的公式为

$$R_d = 0.11A_m \tag{3.11}$$

为得到冠层导度，本文用一种解析方法[*Ronda et al.*, 2001]将植物生理学方法从叶片尺度扩展到冠层尺度。将 A_g 在冠层尺度上积分，

$$\int_0^{LAI} A_g dL = (A_m + R_d)\left\{LAI - \frac{1}{K_x}\left[E_1\left(\frac{\alpha K_x PAR_t}{A_m + R_d}e - K_x LAI\right) - E_1\frac{\alpha K_x PAR_t}{A_m + R_d}\right]\right\} \tag{3.12}$$

假设光合有效辐射随叶面积指数呈指数递减，

$$PAR = K_x PAR_t e^{-K_x L} \tag{3.13}$$

其中 K_x 为消光系数。

从而，获得冠层尺度的导度 g_c^c，

$$g_c^c = \int_0^{LAI} \left[\frac{g_{\min}}{1.6} + \frac{a_1 A_g}{(C_s - \Gamma)\left(1 + \frac{D_s}{D_*}\right)} \right] dL$$

$$= \frac{g_{\min}^w}{1.6} LAI + \frac{a_1 (A_m + R_d)}{(C_s - \Gamma)\left(1 + \frac{D_s}{D_*}\right)} \times \left\{ LAI - \frac{1}{K_x} \left[E_1\left(\frac{\alpha K_x PAR_t}{A_m + R_d} e^{-K_x LAI} \right) - E_1\left(\frac{\alpha K_x PAR_t}{A_m + R_d} \right) \right] \right\} \tag{3.14}$$

其中 $D_* = D_0 / (a_1 - 1)$，D_0 为水汽压亏缺常数，a_1 为经验系数。

该模型还考虑了土壤水分胁迫对总同化速率的影响，公式为，

$$A_g = A_g^* f(\theta) \tag{3.15}$$

其中，A_g^* 表示未受水分胁迫的总同化速率，$f(\theta)$ 是根区土壤含水量 θ 的函数，作物不受水分胁迫时，值为 1，作物因水分胁迫凋萎时，值为 0。

本文对大叶 LSM 进行了三项重要改进。首先，根据参数最优化的结果，初始模型对土壤干旱情况处理不理想，所以本文对土壤水分胁迫计算进行了修改，用土壤湿度的 Logistic 关系式计算土壤水分胁迫系数 $f(\theta)$，

$$f(\theta) = 1/(1 + \exp(-b_1 - b_2 \beta(\theta))) \tag{3.16}$$

其中 $\beta(\theta)$ 的计算公式为

$$\beta(\theta) = \max\left[0, \min\left(1, \frac{\theta - WP}{FC - WP} \right) \right] \tag{3.17}$$

其中 FC 和 WP 分别为田间持水量和永久性凋萎系数的土壤湿度含量，b_1 和 b_2 为经验系数。用体积分数表示 5 cm 深土壤湿度。

第二，原始 LSM 没有考虑土壤呼吸，此处用夜间生态系统呼吸(FR)和土壤温度 T_s 的观测值进行线性回归，并假设夜间土壤呼吸占 F_N 的 80%，从而得到土壤呼吸 CO_2 通量 F_s 与 5cm 深土壤温度 T_s (°C)的线性关系。

$$F_s = (0.0055 T_s + 0.16) \times 0.8 \tag{3.18}$$

其中 0.8 表示生态系统呼吸的 80%为土壤呼吸[*Bavin*, 2008]。

第三，初始 LSM 没有考虑结露过程。在该试验站点，夜间结露现象相当普遍。我们在能量收支计算中考虑夜间结露和早晨露水蒸发等过程。当大气相对于冠层表面温度的湿度(RH_i)高于 100%时，启动结露程序。当结露发生时，将能量收支计算中冠层对 H_2O 的阻力(r_c^w)设为 0。结露的速率等于能量收支计算的水汽通量。一旦 RH_i 降低到 1 以下，露水便开始以水汽通量的速率蒸发。夜间形成的露水全部蒸发后，叶片蒸腾重新启动。

3.2.2 阻力计算

(1) 冠层阻力

H_2O 的冠层阻力由 LSM 计算，与 CO_2 冠层阻力 r_c^c 的关系为，

$$r_c^c = 1.6 r_c^w \tag{3.19}$$

(2) 边界层阻力

冠层对 H_2O 的边界层阻力是风速、叶宽和 LAI 的函数(Lee, 2009)。假设冠层内风速呈指数衰减，衰减系数取决于 LAI[*Lee*, 2000]，

$$a = -0.030 LAI^2 + 0.66 LAI + 0.70 \tag{3.20}$$

冠层内平均风速 u_c 为，

$$u_c = \frac{u_h}{a}[1 - \exp(-a)] \tag{3.21}$$

$$u_h = u_m \ln[(h-d)/z_o] / \ln[(z_m - d)/z_o] \tag{3.22}$$

叶片边界层对 H_2O 的阻力扩展到冠层尺度为[*Campbell*, 1977; *Shuttleworth and Gurney*, 1990]，

$$r_b^w = \frac{b}{2LAI}\left(\frac{l_w}{u_c}\right)^{0.5} \tag{3.23}$$

其中，b=283 $s^{0.5}$ m^{-1}，l_w 是叶片宽度(= 0.05m)。而冠层对 CO_2 的边界层阻力 r_b^c 为，

$$r_b^c = 1.4 r_b^w \tag{3.24}$$

(3) 空气动力学阻力

用 Monin-Obukhov 相似理论计算叶片层到参考高度 z_m 对水汽和热量的总阻力 r_t, 其中 r_a 取决于水平风速 u_m、动量粗糙度 z_o、参考高度 z_m、冠层温度 T_{sk} 和空气温度 T_a (*Lee et al.*, 2009)。

$$r_t = 1/(u_m C_H) \tag{3.25}$$

$$C_H = k^2 / \{[\ln(z_m - d)/z_o) - \Phi_m][\ln((z_m - d)/z_{oT}) - \Phi_h]\} \tag{3.26}$$

其中 u_m 为参考高度 z_m(大豆冠层取值 3m)的风速，k 为 von Karman 常数，z_o 和 z_{oT} 分别是动量和温度粗糙度。空气动力学的参数为，

$$d = 0.7h;\ z_o = 0.1h;\ z_{oT} = z_o / \exp(kB^{-1}) \tag{3.27}$$

其中 h 为冠层高度，B^{-1} 是界面底层 Dalton 数的倒数，植被冠层 B^{-1} 的平均取值为

$$B^{-1}=2/k \quad [Garratt,\ 1992] \tag{3.28}$$

Φ_m 和 Φ_h 分别是动量和热量的 Monin-Obukhov 相似函数的积分，

当 $\frac{z_m - d}{L} \geq 0$ 时，

$$\Phi_m = \Phi_h = -5\frac{z_m - d}{L} \tag{3.29}$$

当 $\frac{z_m - d}{L} < 0$ 时，

$$\Phi_h = 2\ln\left(\frac{1+x^2}{2}\right) \tag{3.30}$$

$$\Phi_m = \ln\left[\left(\frac{1+x^2}{2}\right)\left(\frac{1+x}{2}\right)^2\right] - 2\tan^{-1}x + \frac{\pi}{2} \tag{3.31}$$

其中，$x = \left(1 - 15\frac{z_m - d}{L}\right)^{1/4}$。将 $\frac{z_m - d}{L}$ 的边界值设定为-1.5~1。

L为Monin-Obukhov长度，

$$L = -u_*^3 / [k(g/T_0)(H_0/\rho c_p] \tag{3.32}$$

冠层内的空气动力学阻力 $r_{a,s}$ 的计算式为，

$$r_{a,c} = \frac{h}{KH} \tag{3.33}$$

其中，h为冠层高度，KH是冠层顶的涡度扩散系数，

$$KH = \frac{0.4u*(h-d)}{\Phi_{h,c}} \tag{3.34}$$

其中$\Phi_{h,c}$为热量的Monin-Obukhov相似函数从地表到冠层高度的积分。$u*$ 是摩擦风速 (m s^{-1})。

表层的空气动力学阻力，为 r_t 和 r_b^w 之差，

$$r_a = r_t - r_b^w \tag{3.35}$$

3.2.3 同位素分馏效应

(1) 平衡分馏系数

水汽和液态水之间的 ^{18}O-H_2O 平衡分馏系数是液态水温度的函数[*Majoube*, 1971]，

$$\ln\alpha_{eq} = \frac{1.137}{T_{sk}^{\ 2}}\times 10^3 - \frac{0.4156}{T_{sk}} - 2.0667\times 10^{-3} \tag{3.36}$$

$$\varepsilon_{eq}^{w} = \left(1-\frac{1}{\alpha_{eq}}\right)\times 1000\text{，‰} \tag{3.37}$$

其中 T_{sk} 是冠层表面温度，单位为 K，由 LSM 计算而得。

在本文的观测阶段，结露普遍发生[*Welp et al.*, 2008]，结露开始时，δ_E 从很大的正值突然变化到很大的负值，蒸散的值从正变到负。我们的模型中，在结露发生时，将 *LE* 计算公式中的冠层阻力 r_c^w 设为 0，假设叶片蒸发点水和蒸腾水与环境空气中水汽达到平衡，同位素含量计算公式为，

$$\delta_E = \delta_v + \varepsilon_{eq}^{w} \tag{3.38}$$

$$\delta_{L,e} = \delta_v + \varepsilon_{eq}^{w} \tag{3.39}$$

(2) 动力学分馏系数

在 H_2O 和 CO_2 从胞间隙向自由大气扩散的过程中，动力学分馏效应使得较重分子 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 扩散得较慢。以往，人们认为生态系统尺度上，空气湍流会降低动力学分馏作用。但是 *Lee* 等(2009)的研究表明，计算动力学分馏系数需要同时考虑湍流扩散和分子扩散的作用。冠层对 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 的动力学分馏系数 ε_k^w 和 ε_k^c 的计算公式分别为

$$\varepsilon_k^w = \frac{21r_b^w + 32r_c^w}{r_a + r_b^w + r_c^w}\text{，‰} \tag{3.40}$$

$$\varepsilon_k^c = \frac{5.8r_b^c + 8.8r_c^c}{r_a + r_b^c + r_c^c}\text{，‰} \tag{3.41}$$

$$\alpha_k^w = 1 + \frac{\varepsilon_k^w}{1000} \tag{3.42}$$

其中 r_a 为冠层表层的空气动力学阻力，r_b^w 和 r_b^c 分别为冠层对 H_2O 和 CO_2 的叶片边界

层阻力，r_c^w 和 r_c^c 为 H_2O 和 CO_2 的冠层阻力。系数 α_k^w (>1)表示分馏之后和分馏之前 H_2O 的 $^{18}O/^{16}O$ 分子比之比，而 ε_k^w 表示动力学分馏作用引起的同位素富集程度。

土壤对 $^{18}O\text{-}CO_2$ 的动力学分馏系数 $\varepsilon_{k,s}^c$ 为，

$$\varepsilon_{k,s}^c = \frac{8.8 r_s^c}{r_a + r_{a,c} + r_s^c}\text{，‰} \tag{3.43}$$

3.2.4 叶片 $^{18}O\text{-}H_2O$ 含量非稳态理论

$\delta_{L,e}$ 是决定大气 CO_2 的 ^{18}O 含量的关键因子。一些研究表明，在湿度状况有日变化的情况下，叶片水通常处于非稳定状态，即源水与蒸腾水的同位素含量不同[*Cernusak et al.*, 2005; *Cernusak et al.*, 2002; *Harwood et al.*, 1998; *Wang and Yakir*, 1995]。考虑叶片水含量的变化和 Péclet 效应，非稳定状态下蒸发点的 $^{18}O\text{-}H_2O$ 含量的 $\delta_{L,e}$ 计算公式为[*Farquhar and Cernusak*, 2005]，

$$\delta_{L,e} = \delta_{L,es} - \frac{\alpha_k^w \alpha_{eq} r_t}{W} \cdot \frac{d\left(W \cdot \frac{1-e^{-P}}{P} \cdot \delta_{L,e}\right)}{dt} \tag{3.44}$$

其中 r_t 是 $H_2{}^{16}O$ 在空气中扩散的冠层阻力(包含气孔阻力和边界层阻力[*Farquhar et al.*, 1989])，W 为叶片含水量(g m^{-2}，单位土地面积上的水质量)，t 为时间，P 为 Péclet 数[*Farquhar and Lloyd*, 1993]，是蒸腾速率(E)的函数：

$$P = \frac{EL_{eff}}{CD} \tag{3.45}$$

其中，C 为液态水密度；L_{eff} 为距离叶片蒸发点的有效“径向”长度。D 为 $^{18}O\text{-}H_2O$ 在水中的扩散率，是冠层表面温度的函数：$D = 119 \cdot 10^{-9} \cdot \exp[-637/(T_{sk} + 137)]$，[*Cuntz et al.*, 2007]；*Farquhar* 和 *Cernusak* [2005]文章中，公式 3.45 是基于叶片水的 $^{18}O\text{-}H_2O$ 质量守恒原理。此处我们将其扩展到冠层尺度。为与冠层尺度的应用一致，用试验观测的 LAI 和叶片水含量的乘积计算 W。

公式 3.45 中，$\delta_{L,es}$ 为稳定状态下蒸发点水同位素富集程度，

$$\delta_{L,es} = (R_{es} / R_{VSMOW} - 1) \times 1000 \quad (‰) \tag{3.46}$$

$$\frac{R_{es}}{R_x} = \alpha_{eq}\left[\alpha_k (1 - RH_i) + RH_i \frac{R_v}{R_x}\right] \tag{3.47}$$

其中 R_v、R_x 和 R_{es} 分别为外界大气中水汽、茎杆水和叶片蒸发点水的 $^{18}O/^{16}O$ 比。

本文中，$\delta_{L,e}$ 被用作计算 CO_2 和 H_2O 之间的同位素交换。但是，$\delta_{L,e}$ 无法直接测得。为了进行模型检验，我们将 δ_E 和叶片体积水的 $^{18}O\text{-}H_2O$ 含量($\delta_{L,b}$)的计算值与观

测值相对比。

$\delta_{L,b}$ 的计算公式为：

$$\delta_{L,b} = \delta_{L,bs} - \frac{\alpha_k \alpha_{eq} r_t}{w_i} \cdot \frac{1-e^{-P}}{P} \cdot \frac{d\left(W \cdot \delta_{L,b}\right)}{dt} \tag{3.48}$$

其中 $\delta_{L,bs}$ 是稳态条件下叶片体积水的 $\delta^{18}O\text{-}H_2O$，由 $\delta_{L,es}$ 和 P 算得：

$$\delta_{L,bs} = \frac{\delta_{L,es}(1-e^{-P})}{P} \tag{3.49}$$

公式 3.44 和 3.49 迭代计算，每个公式左右两边之差的初始值分别设定为 0.5 和 0.2。当公式两边差值足够小时，迭代完成。通常，每个时步的计算需要 30 到 40 步迭代。

此处，δ_E 由 $\delta_{L,e}$ 与其稳态值 $\delta_{L,es}$ 的差距获得：

$$\delta_E = \frac{\delta_{L,e} - \delta_{L,es}}{\alpha_k \alpha_{eq}(1-RH_i)} \tag{3.50}$$

由于结露频繁发生[*Welp et al.*, 2008]，所以模型对此有所考虑，结露时，r_c^w 设为 0，叶片蒸发点和蒸散水的 $^{18}O\text{-}H_2O$ 含量 $\delta_{L,e}$ 和 δ_E 与外界大气的水汽平衡，

$$\delta_E = \delta_v + \varepsilon_{eq}^w \tag{3.51}$$

$$\delta_{L,e} = \delta_v + \varepsilon_{eq}^w \tag{3.52}$$

光合作用和呼吸作用中，CO_2 分子与叶片水和土壤水进行水合反应，交换氧原子。气态 CO_2 与液态水之间的平衡分馏系数是温度的函数，

$$\varepsilon_{eq}^c = \frac{17604}{T} - 17.93 \quad (‰) \tag{3.53}$$

其中 CO_2 与土壤水进行同位素交换是，T 为土壤温度(T_s)；与叶片水进行同位素交换时，T 为冠层表面温度(T_{sk})。

3.2.5 $^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素驱动力子模型

Lee 等(2009)认为垂直速度与用 delta 符号表示的同位素含量之间的协方差($\overline{w'\delta'}$)是 δ 的涡度通量。物理学上，该协方差表示大气 δ 收支相的表面边界层情况，可以用大叶模拟方法进行参数化。因此，总协方差包含了冠层组分 $(\overline{w'\delta'})_c$ 和土壤组分 $(\overline{w'\delta'})_s$：

$$\overline{w'\delta'} = \left(\overline{w'\delta'}\right)_c + \left(\overline{w'\delta'}\right)_s \tag{3.54}$$

$$\left(\overline{w'\delta'}\right)_c = \frac{F_c}{C_a}\left[\frac{C}{C-C_a}\left(\delta_{L,e}^c - \delta_a^c\right)\theta_{eq} + \left(1-\theta_{eq}\right)\varepsilon_k^c \frac{C}{C_a} - \varepsilon_k^c\right] \tag{3.55}$$

$$\left(\overline{w'\delta'}\right)_s = \frac{F_s}{C_a}\left[\frac{C_s}{C_s-C_a}\left(\delta_s^c - \delta_a^c\right) - \varepsilon_{k,s}^c\right] \tag{3.56}$$

其中 F_c 和 F_s 是净生态系统 CO_2 交换的冠层和土壤组分，由 LSM 模型计算得到。δ_a^c 是环境大气的 $^{18}O\text{-}CO_2$ 含量。δ_s^c 和 $\delta_{L,e}^c$ 分别是土壤空气和叶片蒸发点上 $^{18}O\text{-}CO_2$ 的 δ 值，模型中假设 CO_2 与土壤水充分平衡，通过土壤水和叶片蒸发点水的 $^{18}O\text{-}H_2O$ 的 δ 值计算。θ_{eq} 表征叶片中 CO_2 水合作用的程度，大豆生态系统 θ_{eq} 取值 0.75[*Gillon and Yakir*, 2000a]。

土壤中空气 CO_2 含量 C_s 和叶片的胞间 CO_2 浓度分别是，

$$C_i = C_a + F_c\left(r_a + r_b^c + r_c^c\right) \tag{3.57}$$

$$C_s = C_a + F_s\left(r_a + r_{a,c} + r_s^c\right) \tag{3.58}$$

其中 C_a 取自观测数据，其他变量为模型计算值。

该子模型的驱动因子为 C_a 和 δ_a^c，为参考高度即地面以上 3.0 m 上测量(附录 2)。所有其他参数 (F_c、F_s、r_a、$r_{a,c}$、r_b^c、r_c^c、ε_k^c、$\varepsilon_{k,s}^c$、δ_s^c 和 $\delta_{L,e}^c$) 由 LSM 和 $^{18}O\text{-}H_2O$ 子模型算得。$^{18}O\text{-}CO_2$ 含量参考 Vienna Pee Dee Belemnite (VPDB)标准。最后将公式 3.54 至 3.56 的计算值与 $\overline{w'\delta'}$ 的涡度相关直接观测进行对比。

3.3 参数化方法

LSM 模型是建立能量收支守恒原理的基础之上，但是涡度相关方法观测的能量平衡普遍存在不闭合的情况，这使得 LSM 模型的验证处于两难境地，因为模型的精度最高只能达到验证数据的精度。本文中的涡度相关观测数据中，在忽略冠层热容量的情况下，观测的潜热通量(*LE*)、感热通量(*H*)和土壤热通量(*G*)的总和只有净辐射(R_n)的 69%。为了满足能量守恒条件，首先假设可用能量(R_n - *G*) 和 Bowen 比 *H*/*LE* 的测量是精确的，然后强迫能量平衡闭合来调整 *LE* 和 *H* 观测。其他研究者也报导了模型的参数化和验证中强迫能量平衡闭合的重要性。在此调整过程中，关键的模型参数是光合作用和气孔阻力公式中的参数[*Aranibar et al.*, 2006]。

LSM 子模型中有 4 个可调参数。其中两个参数 b_1 和 b_2 描述土壤湿度对光合作用的影响(公式 3.15 和 3.16)，另外两个为气孔阻力参数化中的参数(*Ronda et al.* [2001] 文章中公式中的水汽压亏缺常数 D_0 和细胞内外 CO_2 浓度之比的最低值 a_1)。由于缺乏叶片尺度的生理生态学观测数据对这些参数进行约束，所以用生态系统尺度的数据进行参数最优化。首先，用最小二乘法对 D_0 和 a_1 进行最优化，使净生态系统 CO_2 通量

(F_N)的计算值与观测值最接近。然后，用 LE 的预测值对 b_1 和 b_2 进行最优化。最优化的结果是当 $\theta \leq 0.21$ 时，b_1= -5.8，b_2 = -24.9；当 $\theta > 0.21$ 时，b_1= -1.5，b_2 = -24.9。

^{18}O-H_2O 子模型中有一个自由参数 L_{eff}，即 Péclet 数中扩展有效“径向”长度。用正午叶片水的 ^{18}O 含量($\delta_{L,b}$)对其进行最优化，L_{eff} 的最优值为 1×10^{-8} mm。这比其他作者发现的典型值要低，如 *Phaseolus vulgaris* 的 L_{eff} 为 6.25 mm，*Ricinus communis* 为 13.5 mm [*Barbour and Farquhar*, 2000; *Barbour et al.*, 2000; *Cernusak et al.*, 2003; *Flanagan et al.*, 1994]。通过对比 $\delta_{L,b}$ 的观测值以及 Farquhar 和 Cernusak 公式的计算值，*Welp et al.* [2008] 得到 L_{eff} 值为 20 mm，他们采用的动力学分馏系数忽略了空气动力学扩散的影响。本文得到的 L_{eff} 如此低，表示大豆系统叶片内 ^{18}O 的返回扩散极低。

^{18}O-CO_2 同位素驱动力子模型中有两个自由参数：叶片中 CO_2 的水合程度系数 θ_{eq} 和土壤对 CO_2 的阻力 r_s^c。模型中大豆 θ_{eq} 的默认值取自 *Gillon* 和 *Yakir* [2000a]的研究结果。r_s^c 的值为土壤对 H_2O 的阻力乘以 1.6 [*Shuttleworth and Gurney*, 1990]。我们并未对这些参数进行调整，这样同位素驱动力的模型计算值与观测值之间的差异能帮助我们确定目前对同位素交换认识中存在的不足。

模型模拟时段从DOY 195至240。该时段内，冠层充分闭合(LAI > 2)。土壤对H和LE的贡献应该很小，在模型中被忽略。

第四章 模型驱动因子观测值

如表 3.1 所示，SiLSM 模型的驱动因子为以下田间观测值：(1)植物因子，包括叶面积指数(LAI)，冠层高度(h) 和叶片含水量(W)；(2)微气象因子，包括空气温度(T_a)、土壤温度(T_s)、大气空气相对湿度(RH)、土壤湿度(θ)、太阳辐射(R_S)、天空长波辐射(R_L)、大气 CO_2 浓度(C_a)、风速(u_m)和摩擦风速(u^*)，其中 T_s 和 θ 在土壤 5cm 深处测量，其他因子在地面以上 3.0m 的参考高度上测量；(3)参考高度上大气 CO_2 和水汽的 ^{18}O 含量 δ_a 和 δ_v，茎杆水和土壤水的 ^{18}O-H_2O 含量 δ_x 和 δ_s。

并非以上所有驱动变量的观测步长都为 30 分钟(SiLSM 模型的步长)。LAI、h、δ_x 和 δ_s 的观测不连续，因此进行了线性内插。而将加密观测的日变化(图 4.3b)和每周数据的季节变化(图 4.3a)相叠加构成 W 的时间序列。

4.1 植物因子观测值

图4.1和4.2为叶面积指数(LAI)和冠层高度(h)观测值的时间序列。2006年大豆5月25日(DOY 145)播种，10月10日(DOY 283)收割。LAI最大值出现在8月3日(DOY 215)前后，为8.15，此时冠层高度为0.93 m。冠层高度最大值为1.05 m，出现时间略晚于LAI最大值，为8月16日(DOY 228)前后。

叶片含水量是确定非稳态叶片水δ的关键因子。从DOY 159至241，每周一次测量正午叶片含水量(图4.3a)。生长季初期，叶片水含量为128.9 g m^{-2}(单位叶片面积所含水质量)，在叶片衰老期前降至100.7 g m^{-2}，平均值为111.2 g m^{-2}。在加密观测时期，每3小时一次测量冠层顶部和底部叶片含水量。冠层底部叶片含水量的日变化幅度比顶部叶片大。底部叶片含水量正午约为79.6 g m^{-2}，夜间为125.5 g m^{-2}。顶部叶片，正午含水量为94.1 g m^{-2}，夜间为120.7 g m^{-2}，均值为109.2 g m^{-2}。

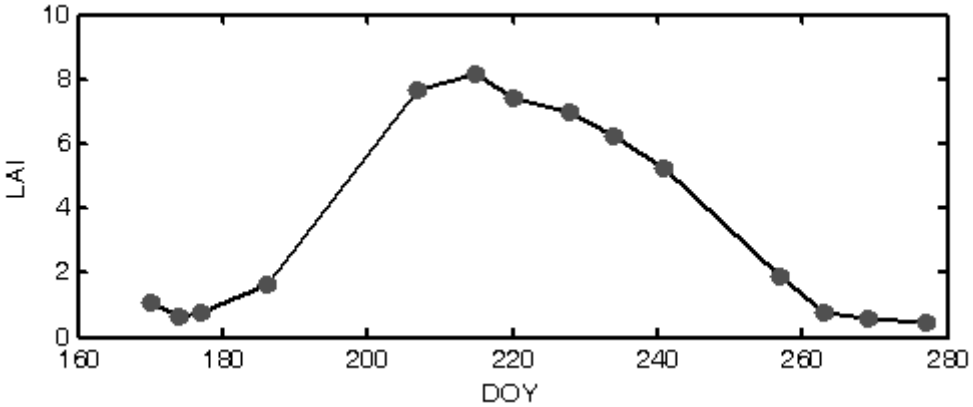


图 4.1 叶面积指数(LAI)观测值的时间序列

Figure 4.1 Time series of leaf area index (LAI) measurement

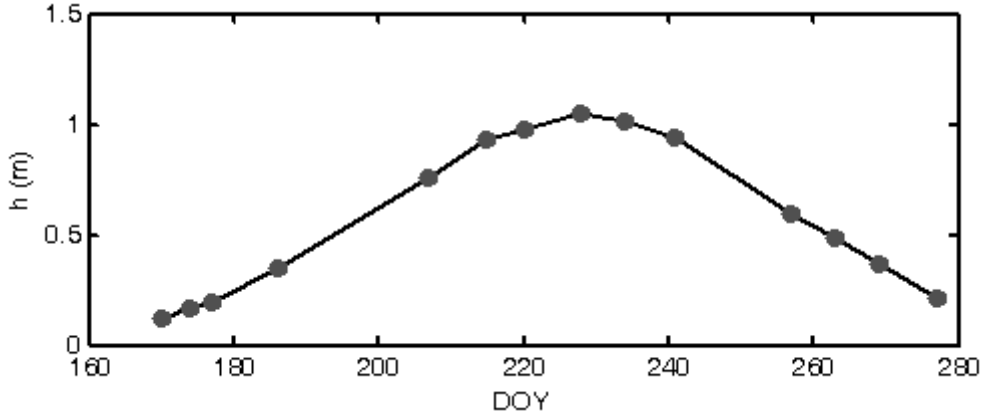


图 4.2　冠层高度观测值的时间序列

Figure 4.2　Time series of canopy height observation

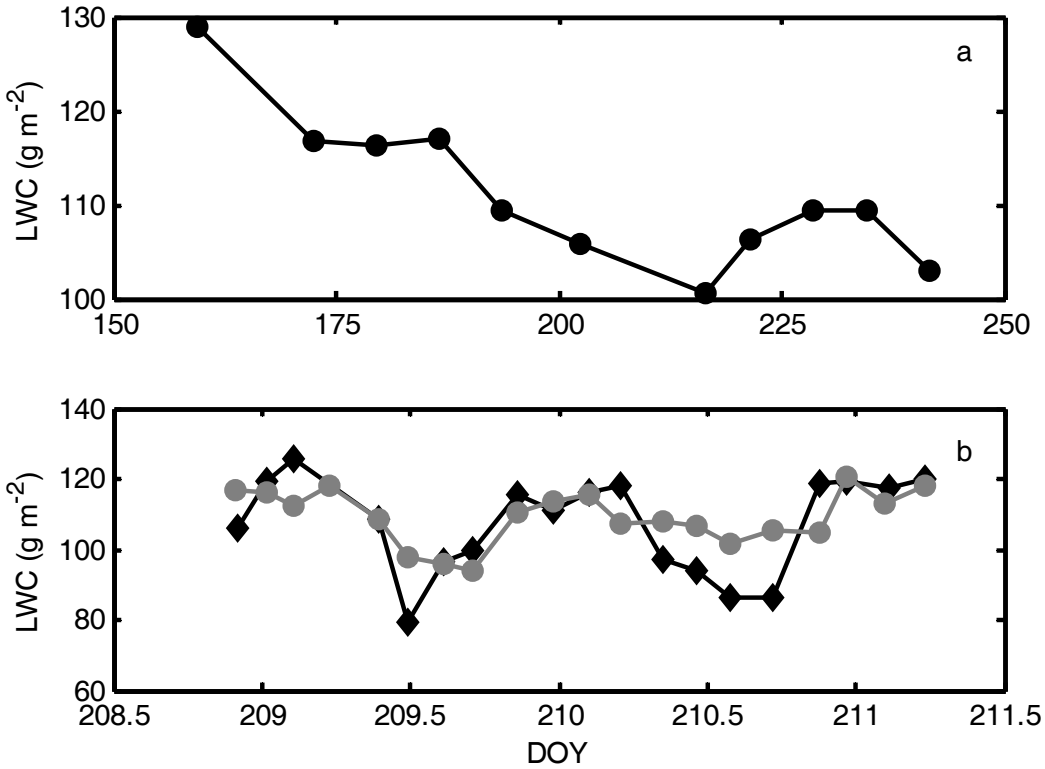


图 4.3　叶片含水量的时间变化

Figure 4.3　Time variations of leaf water content

单位为每平方米叶面积含水克数 In units of *g* of water per m^2 of leaf area, *g* m^{-2};　a, 正午叶片含水量的季节变化 Seasonal variation measured at midday;　b, 加密观测时期冠层上层(圆点)和下层(菱形)叶片含水量日变化 Diurnal variation in the upper canopy layer (dots) and lower canopy layer (diamonds) during the intensive measurement period

4.2 环境因子观测值

4.2.1 温度

空气温度(T_a)具有明显季节变化和日变化。T_a 日平均值的季节变化明显，最高值为 303.6 K (DOY 212)，最低值为 291.9 K (DOY 236)，变化幅度为 11.7 K。T_a 的日最高值一般出现在下午，最低值出现在午夜至凌晨。如 T_a 日较差(00:30 至 24:00)的最大值出现在 DOY 196，为 15.1K，其中 T_a 日最高值为 307.2K(14:00)，日最低值为 292.0K (05:30)；T_a 日较差最低值出现在 DOY 225，为 3.6 K，其中 T_a 日最高值为 295.5K (11:00)，日最低值为 291.9K(24:00)。

土壤温度(T_s, 5cm 深)的季节变化和日变化趋势与 T_a 一致，但日平均值和变化幅度比 T_a 小。T_s 日平均值的最高值也出现在 DOY 212，为 300.3K；最低值为 292.0K，出现在 DOY 232，变化幅度为 8.3K，比 T_a 低。T_s 的日变化幅度小于 T_a。日较差最大为 9.1K(DOY 199)，日最高值和最低值分别为 302.4 K(14:00)和 293.3 K(06:00)；最小日较差为 1.3K(DOY 225)，日最高值和最低值分别为 297.7 K(13:00)和 293.3 K(24:00)。

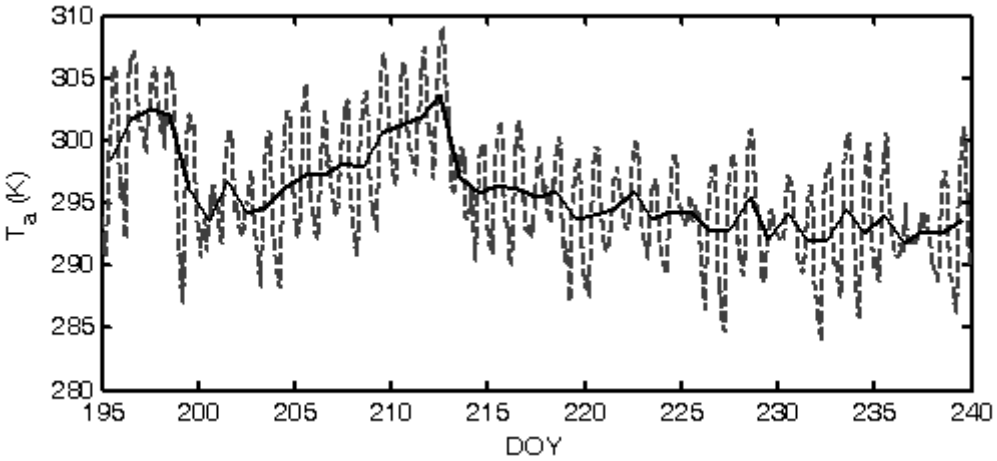


图 4.4　参考高度上的空气温度的半小时观测值(划线)和日平均值(实线)

Figure 4.4 Half-hourly observation (dashed line) and daily mean value (soild line) of air temperature at reference height

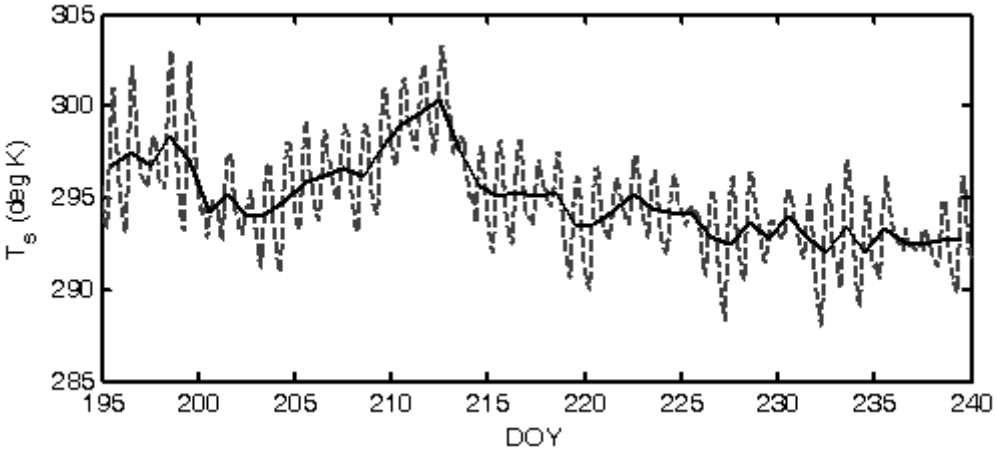


图 4.5　5cm 深土壤温度的半小时观测值(划线)和日平均值(实线)

Figure 4.5 Half-hourly observation (dashed line) and daily mean value (soild line) of soil temperature at 5cm depth

4.2.2 降水和湿度

2006 年较干旱(图 4.6)，在本文的研究的 45 天内(DOY 195-239)，有 28 天出现降水，但是其中降水大于 10mm 的日数仅为 6 天，小于 5mm 的日数为 20 天。较大降水过程发生在 DOY200 (降水量为 31 mm)，DOY 213 至 214 (降水量分别为 39 mm 和 47 mm)，DOY 235 至 237(降水量分别为 19mm、12mm 和 10mm)。

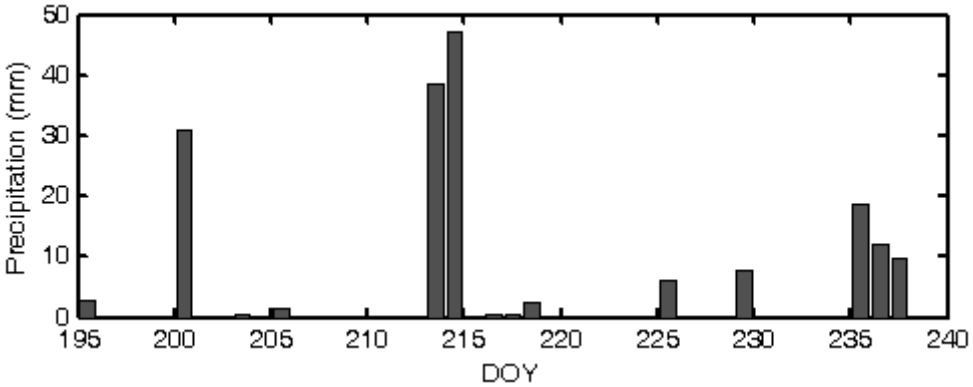


图 4.6　降水的时间序列

Figure 4.6　Time series of precipitation measurement

空气相对湿度(RH)日平均值变化明显，日最高值出现在夜间，最低值在下午，日较差的季节变化较大。日平均值最大为 95%(DOY237)，最小为 60%(DOY 212)。DOY 237 的 RH 最小值为 89%，最大值为 100%，变化幅度为 11%。DOY 212 的 RH 最小值为 45%，最大值为 80%，变化幅度为 35%。降水发生时，RH 较高。RH 日较差最大值为 73%(DOY 198)，RH 日最高值为 100%(02:30)，最低值为 27%(17:30)；日较差最小值为 10%(DOY 229)，RH 日最高值为 96%(24:00)，最低值为 86%(16:30)。

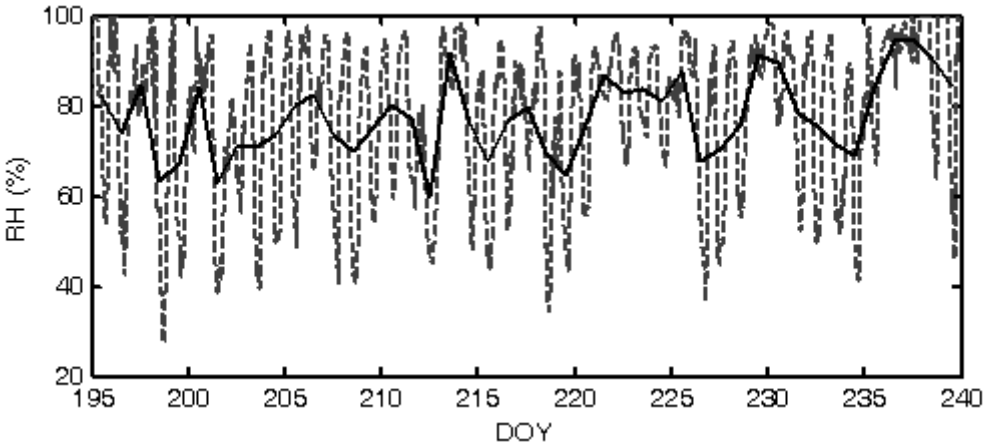


图 4.7　参考高度上的空气相对湿度的半小时观测值(划线)和日平均值(实线)

Figure 4.7　Half-hourly observation (dashed line) and daily mean value (soild line) of relative humidity of air at reference height

该试验田不实施灌溉，主要水分来源是降水，所以土壤湿度主要受降水量的控制。上述降水过程后，土壤湿度明显上升，分别出现在 DOY 201(最大土壤湿度 0.24)、DOY 214 (最大土壤湿度 0.32)和 DOY 237 (最大土壤湿度 0.31)。而每次降水后，土壤湿度持续下降，直到下一次降水为止。在上述较大降水过程之前，都出现干旱状况，其中 DOY 213 和 DOY 234 的土壤湿度低至 0.19，而 DOY 200 的土壤湿度也仅为 0.20。

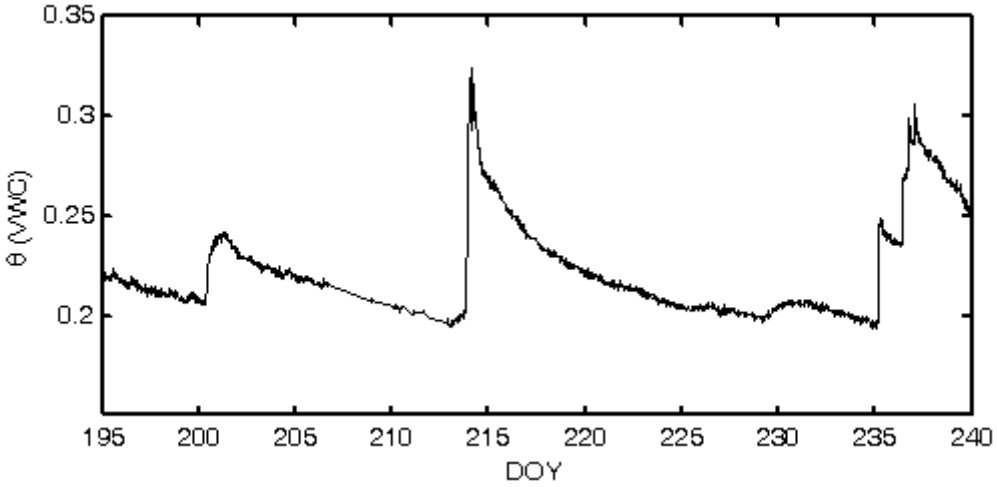


图 4.8　5cm 深处土壤湿度（体积含水量）的半小时观测值

Figure 4.8 Half-hourly observation of soil moisture (Volumetric Water Content, VWC) measured at 5 cm depth

4.2.3 辐射

太阳短波辐射和天空长波辐射具有明显的日变化和季节变化。太阳短波辐射具有明显的日变化，正午前后达到最高，夜间为 0，本生长季内最大值为 940 W m^{-2}。其季节变化受降水过程的影响，降水发生时段，太阳短波辐射日峰值明显小于无降水日，如 DOY212(无降水)的短波辐射最大值为 857 W m^{-2}，DOY 213(降水量为 39 mm)的短波辐射最大值为 317 W m^{-2}。天空长波辐射与空气温度显著相关，R^2＝0.44。模型中将光合有效辐射(PAR)取值为太阳短波辐射的一半。

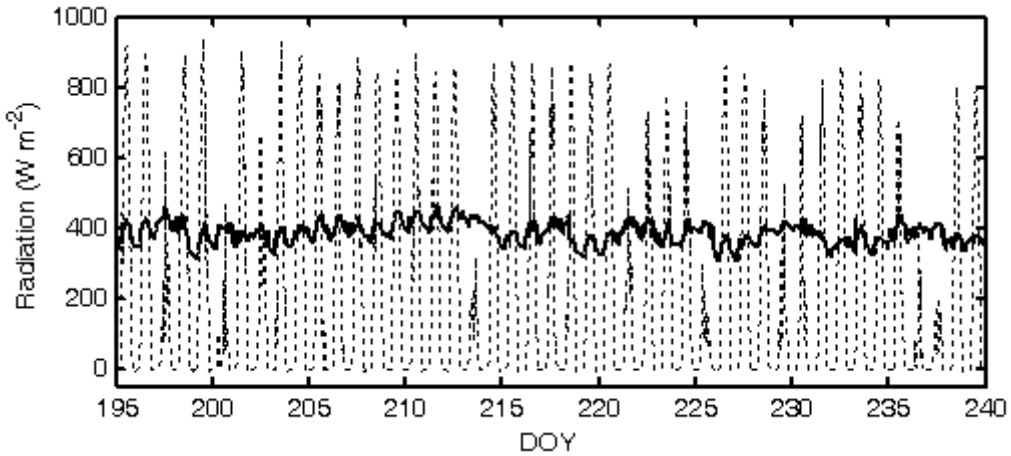


图 4.9　参考高度上接收的太阳短波辐射(虚线)和天空长波辐射(实线)

Figure 4.9 Short-wave solar radiation (dotted line) and sky long-wave radiation (solid line) measured at reference height

4.2.4 大气 CO_2 浓度

参考高度上大气 CO_2 浓度 C_a 的季节变化和日变化明显，而且日变幅差异很大，受降水的影响。图 4.10 中实线为 C_a 日平均值，季节变化较大，最大值为 2.3×10^4 μmolm^{-3} (DOY 239)，最小值 1.6×10^4 μmol m^{-3} (DOY 224)，差值为 1.7×10^4 μmol m^{-3}。C_a 日最高值出现在午夜到凌晨，日出后开始下降，而最小值出现在下午至傍晚，而且降水发生时，C_a 日最高值(夜间)偏小。如最大日较差出现在 DOY 239(无降水)，C_a 最大值为 4.0×10^4 μmol m^{-3} (04:00)，最小值为 1.5×10^4 μmol m^{-3} (14:30)，日较差为 2.5×10^4 μmol m^{-3}。最小日较差出现在 DOY 236(降水为 12mm)，C_a 最大值为 1.7×10^4 μmol m^{-3} (05:00)，最小值为 1.6×10^4 μmol m^{-3} (15:00)，日较差为 0.1×10^4 μmol m^{-3}。

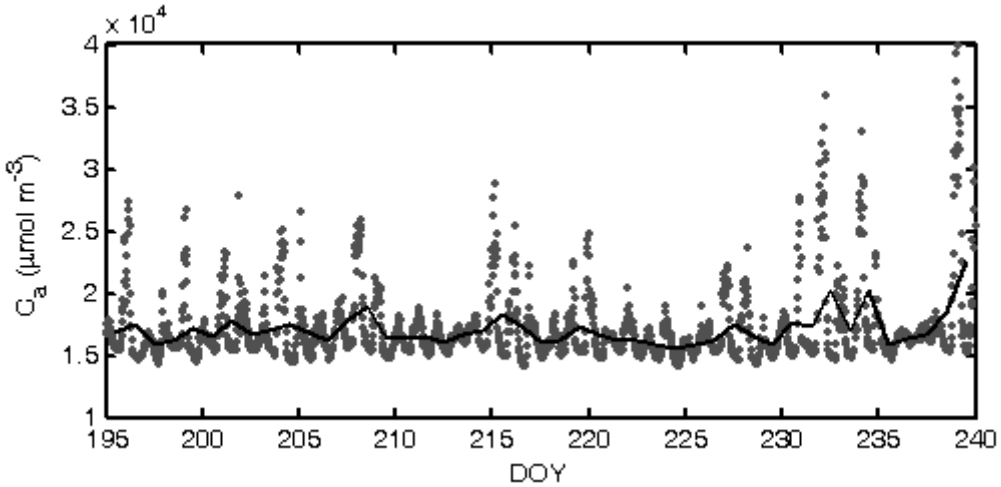


图 4.10　参考高度上空气摩尔浓度的半小时观测值(圆点)和日平均值(实线)

Figure 4.10　Half-hourly observation (dots) and daily mean value (soild line) of atmospheric CO_2 mixing ratio measured at reference height

4.2.5 风速和摩擦速度

参考高度上的风速和摩擦风速变化趋势较一致，二者季节变化明显，日变化的特点为白天较大，夜间较小，甚至趋于 0。日平均风速最大值为 4.2 m s^{-1} (DOY 212)，最小值为 0.5 m s^{-1} (DOY 239)；摩擦速度日平均最大值为 0.5 m s^{-1}(DOY 212)，最小值为 0.1 m s^{-1} (DOY 239)。

二者的日较差都呈明显的季节变化，最大日较差出现在 DOY 197，其中风速日较差为 6.5 m s^{-1}，最大风速为 7.1 m s^{-1}(07:00)，最小风速为 0.6 m s^{-1}(23:30)；摩擦速度日较差为 0.7 m s^{-1}，最大摩擦速度 0.8 m s^{-1}(06:30)，最小摩擦速度为 0.1 m s^{-1}(23:00)。而 DOY 239，二者日较差最小，其中风速日较差为 1.5 m s^{-1}，最大风速为 1.6 m s^{-1} (08:30)，最小风速为 0.1 m s^{-1}(21:30)；摩擦速度日较差为 0.1 m s^{-1}，最大摩擦速度为

0.2 m s^{-1}(13:00)，最小摩擦速度为 0 m s^{-1}(21:30)。

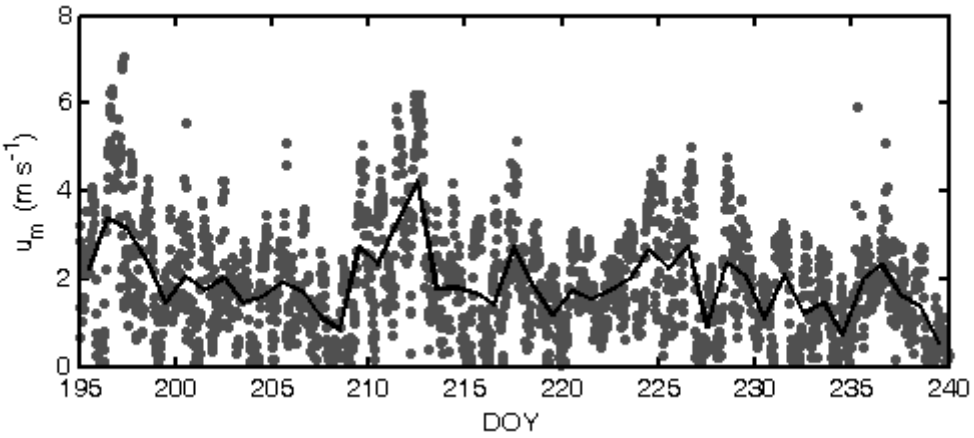


图 **4.11** 参考高度上的风速的半小时观测值(圆点)和日平均值(实线)

Figure 4.11 Half-hourly observation (dots) and daily mean value (soild line) of wind speed at reference height

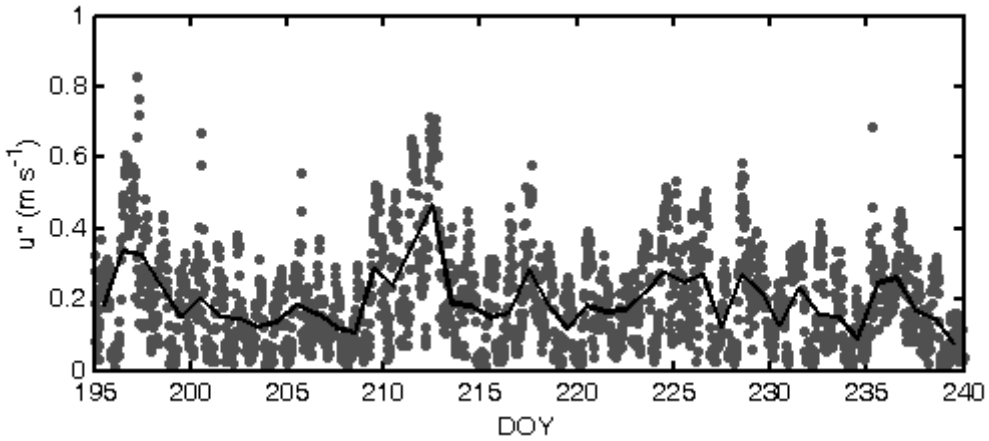


图 **4.12** 参考高度上摩擦速度的半小时观测值(圆点)和日平均值(实线)

Figure 4.12 Half-hourly observation (dots) and daily mean value (soild line) of friction velocity at reference height

4.3 同位素观测值

大气 ^{18}O-CO_2 的 δ 值 δ_a 具有明显的日变化和季节变化。DOY195 至 240，δ_a 最大值为 1.6‰ (DOY 196, 17:30)，最小值为-5.9‰ (DOY 215, 05:30)，变化幅度为-7.5‰。

δ_a 日均值有明显的季节变化，最大值为 0.4‰(DOY 197)，最小值为-2.7‰ (DOY 215)。δ_a 一般最大值出现在傍晚前，最小值出现在夜间，而日较差也有明显的季节变化。δ_a 日较差最大值出现在 DOY 215，为 5.2‰，最小值为-5.9‰(05:00)，最大值为-0.7‰ (15:30)；日较差最小值出现在 DOY 236，为 1.3‰，最小值为-2.5‰(05:30)，最大值为-1.2‰ (15:00)。本文研究时段内(DOY195 至 240)，大气水汽的 $\delta^{18}O$-H_2O 值 δ_v 有明显的日变化和季节变化，并且和天气条件密切相关。δ_v 最大值为 -9.0‰ (DOY198 03:00)，最小值为 -24.2‰ (DOY198 12:00)，变化幅度为 -15.2 ‰。日平均值有明显

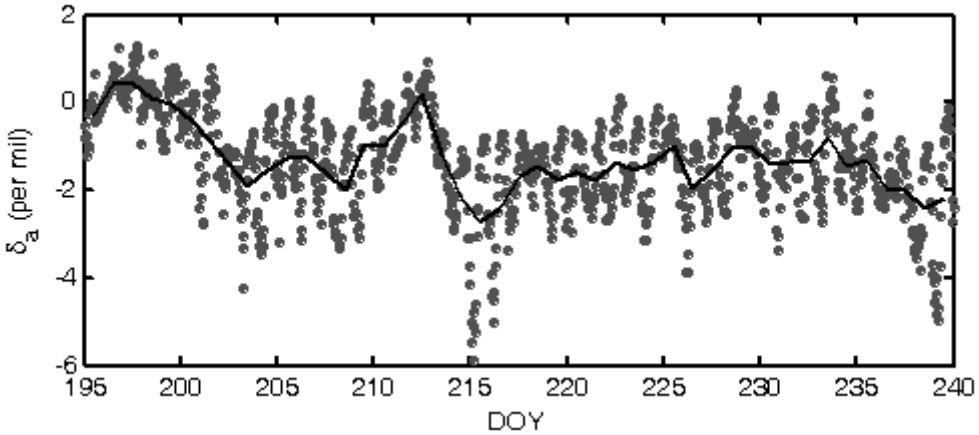


图 **4.13** 参考高度上大气的 $\delta^{18}O$-CO_2 的半小时观测值(圆点)和日平均值(实线)

Figure 4.13 Half-hourly observation (dots) and daily mean value (soild line) of $\delta^{18}O$-CO_2 value at reference height

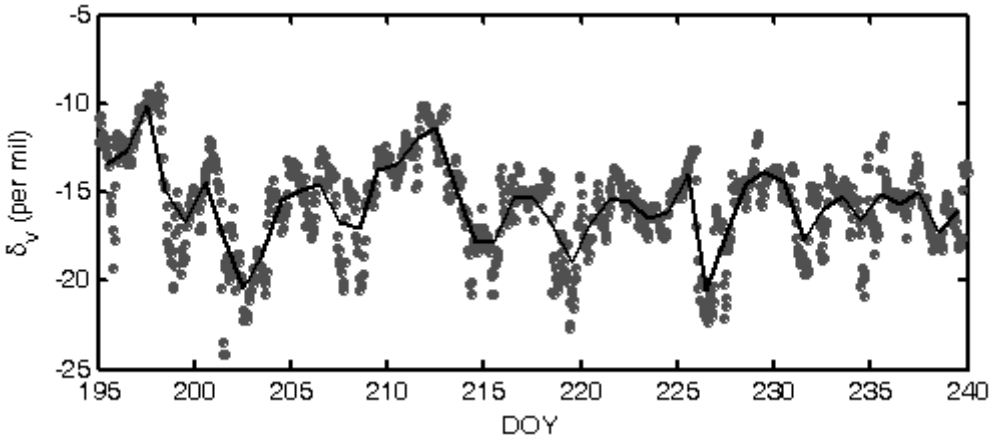


图 **4.14** 参考高度上大气水汽的 $\delta^{18}O$-H_2O 的每小时观测值(圆点)和日平均值(实线)

Figure 4.14 Hourly observation (dots) and daily mean value (soild line) of $\delta^{18}O$-H_2O value of atmospheric water vapor at reference height

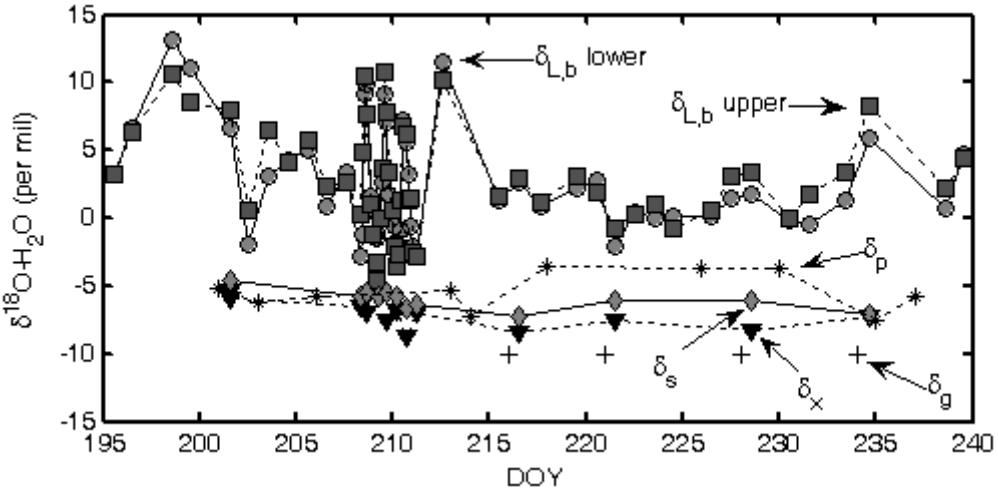


图 **4.15** 生态系统水体 $\delta^{18}O$-H_2O 值

Figure 4.15 $\delta^{18}O$-H_2O value of ecosystem water pool

方块 Squares: $\delta_{L,b}$ upper;圆点 Dots: $\delta_{L,b}$ lower; 倒三角 Triangles: δ_x；星号 Stars：δ_p;十字 Cross：δ_g；菱形 Diamonds：δ_s

的季节变化，最高为 -10.1 ‰ (DOY 197)，最低为-20.6 ‰ (DOY 226)。

日较差的季节变化也很明显。最大日较差出现在 DOY198，为 11.4‰，该日 δ_v 最大值为-9.0‰(02:30 至 03:00)，最小值为-20.4‰(20:30 至 21:00)。最小日较差出现在 DOY 217，为 1.7‰，该日 δ_v 最大值为- 14.8‰(16:30 至 17:00)，最小值为-16.5‰(12:30 至 13:00)。日平均 δ_v 值与日平均气温呈线性相关[*Welp et al.*, 2008]。

生态系统水体中，叶片水 $^{18}O\text{-}H_2O$ 的 δ 值 $\delta_{L,b}$ 最大，而且季节变化和日变化最明显。上、下层叶片正午 $\delta_{L,b}$ 的最大值分别为 10.7‰和 13.2‰，最小值分别为-2.8‰和-2.1‰，变化幅度分别为 13.5‰和 15.3‰。DOY 208 至 210 为加密观测时段，可以看出上层叶片 $\delta_{L,b}$ 的日变化幅度比下层叶片大。如 DOY 209，上、下层叶片 $\delta_{L,b}$ 的日最大值分别为 10.8‰和 9.2‰(13:00)，最小值分别为-4.5‰ (05:30)和-1.5‰ (04:30)，日较差分别为 15.3‰和 10.7‰。Welp 等[2008]的分析发现 $\delta_{L,b}$ 的变化与空气相对湿度(参考温度为冠层温度)相关密切。

总体看来，其他生态系统水体的 $\delta^{18}O\text{-}H_2O$ 值均小于 0，其中 δ 值由高到低的顺序为：降水(δ_p)、土壤水(δ_s)、茎杆水(δ_x)和地下水(δ_g)，其变化范围分别为 δ_p -7.5‰至-3.6‰，δ_s -4.5‰至-7.3‰，δ_x -5.3‰至-8.7‰，δ_g 几乎没有变化，维持在-10.0‰。

第五章 模型结果

用一致性指数(I)、均方根误差(RMSD)和平均误差(ME)度量模拟结果。一致性指数 I [*Willmott*, 1981]为：

$$I = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(p_i - o_i)^2}{\sum_{i=1}^{N}(|p_i - \bar{o}| + |o_i - \bar{o}|)^2} \tag{5.1}$$

其中 p_i 和 o_i 表示第 i 个模拟值和观测值； N 为观测值总数；$\bar{o}$ 为 N 个观测值的平均值。I 为 1 时表示模拟值与实测值完全吻合，0 表示二者完全不符。RMSD 的定义为：

$$RMSD = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(p_i - o_i)^2\right]^{1/2} \tag{5.2}$$

ME 表示模拟值与观测值之间的平均误差，定义为：

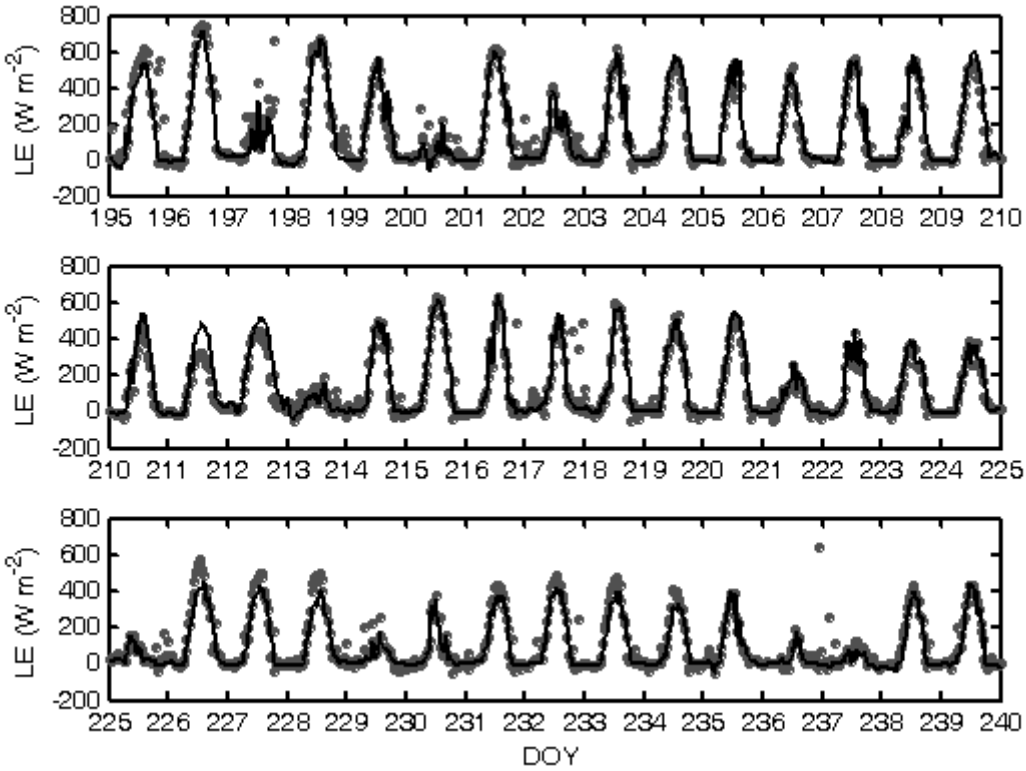
$$ME = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(p_i - o_i) \tag{5.3}$$

5.1 水、热和 CO_2 通量

图 5.1 至 5.3 为潜热通量 LE、感热通量 H 和生态系统净 CO_2 通量 F_N 的观测值与模拟值的时间序列和 1 比 1 图。在校准模型之前，我们首先用 Bowen 比方法调整 LE 和 H 的测量值，强迫能量平衡闭合。LE、H 和 F_N 观测值的最大值(最小值)分别为 748 (-50) W m^{-2}、196 (-293) W m^{-2} 和 33 (-13) μmol m^{-2} s^{-1}。模型能较好的模拟 LE、H 和 F_N 的季节变化和日变化，一致性指数(I)分别为 0.97、0.78 和 0.94，RMSD 分别为 57 W m^{-2}、46 W m^{-2} 和 6 μmol m^{-2} s^{-1}，ME 分别为-3 W m^{-2}、1 W m^{-2} 和-1 μmol m^{-2} s^{-1}。

该模型在两个阶段的模拟中存在明显偏差，即 DOY 209-212 和 226-235，这表明模型不能很好的处理水分胁迫的情况（即土壤湿度很低的情况）。这也是很多模型存在的普遍问题。在第一阶段，LE、H 和 F_N 的 I 分别为 0.96、0.75 和 0.35，RMSD 分别为 75 W m^{-2}、63W m^{-2} 和 3μmol m^{-2} s^{-1}，ME 分别为 41 W m^{-2}、-30 W m^{-2} 和-0.3 μmol m^{-2} s^{-1}。例如 DOY 211 正午 LE 模拟值和观测值分别为 448 和 305 W m^{-2}，F_N 为 13.7 和 8.5 μmol m^{-2} s^{-1}，H 为 72 和 144 W m^{-2}。此前，较明显的一场降雨 (> 31 mm)发生在 DOY 200，而后，土壤湿度持续下降，直至生长季中最低湿度值 0.19 m^3 m^{-3}(5 cm 深)。尽管 LAI 在 DOY 212 约为 8，但 F_N 的观测值很低，仅为 PAR 相同、土壤湿度较高的 DOY 215 的 1/3。第二阶段，LE 和 F_N 的模拟值偏低，ME 分别为-16 W m^{-2} 和-3 μmol m^{-2} s^{-1}，H 模拟值偏高，ME 为 17 W m^{-2}。在此阶段，θ 较低，为 0.19 到

a. 潜热通量的模拟值（实线）和观测值（圆点）



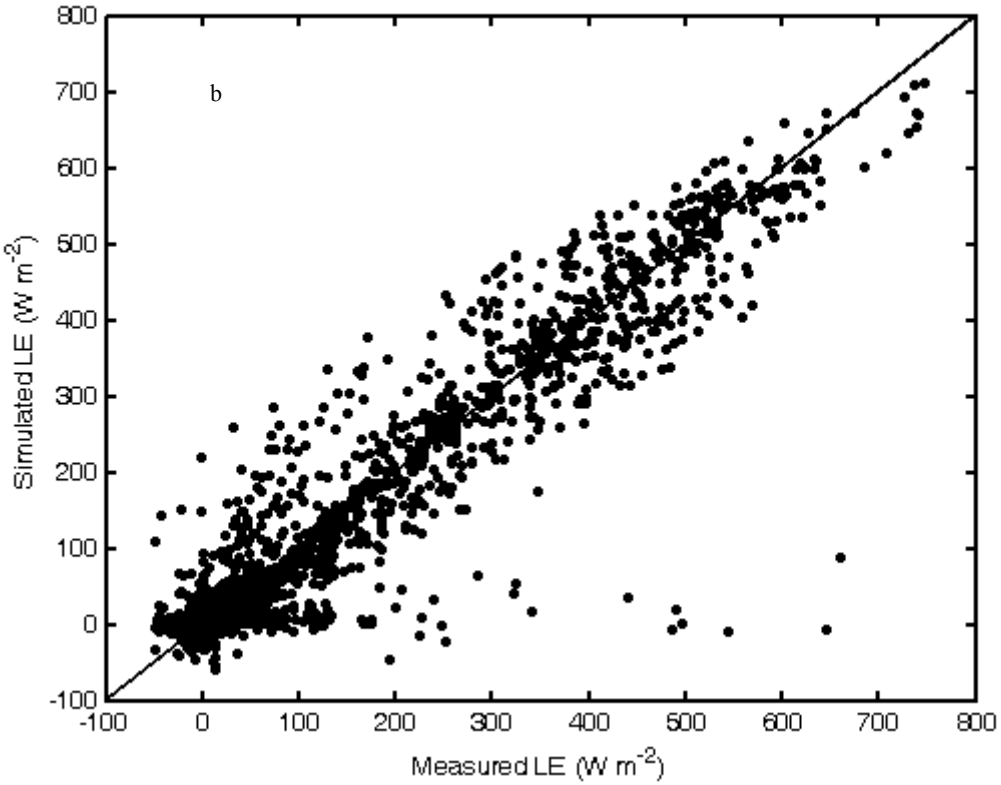
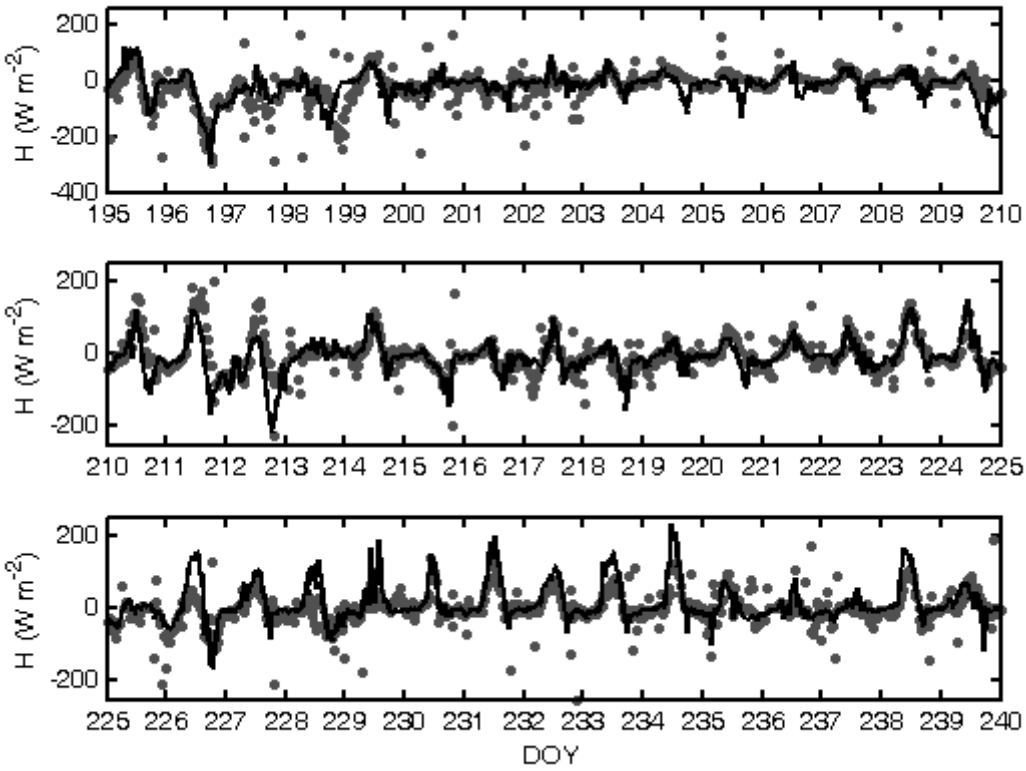


图 **5.1** 潜热通量(***LE***)的模拟值和观测值的时间序列(a)和 1:1 图(b)

Figure 5.1 Time series and 1:1 plot for the simulated and observed latent heat flux (*LE*)

a. 感热通量(***H***)的模拟值(实线)和观测值(圆点)



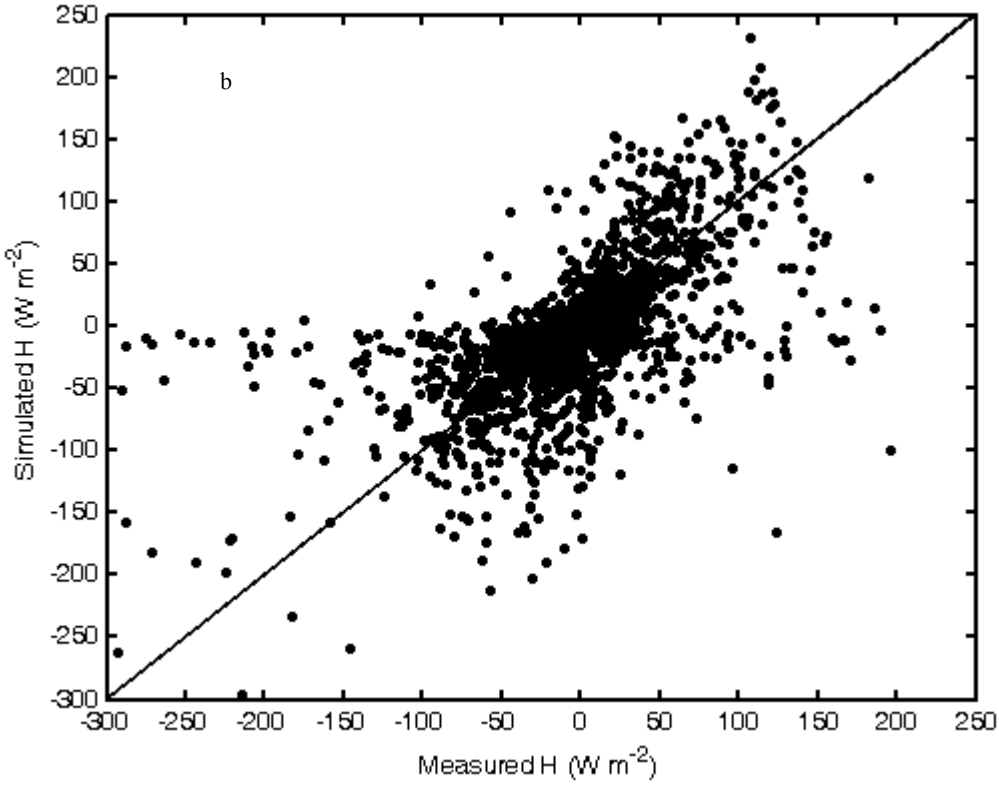
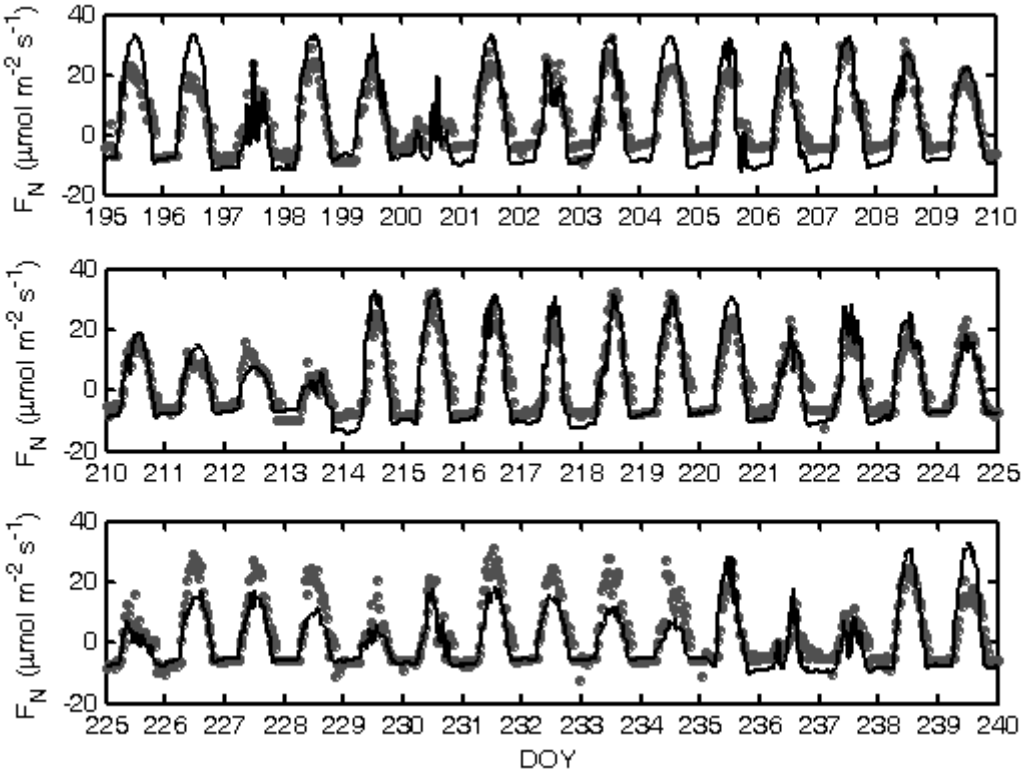


图 **5.2** 感热通量(***LE***)的模拟值和观测值的时间序列(a)和 1:1 图(b)

Figure 5.2 Time series (a) and 1:1 plot (b) for the simulated and observed sensible heat flux (*LE*)

a. 净生态系统 CO_2 交换(F_N)的模拟值(实线)和观测值(圆点)



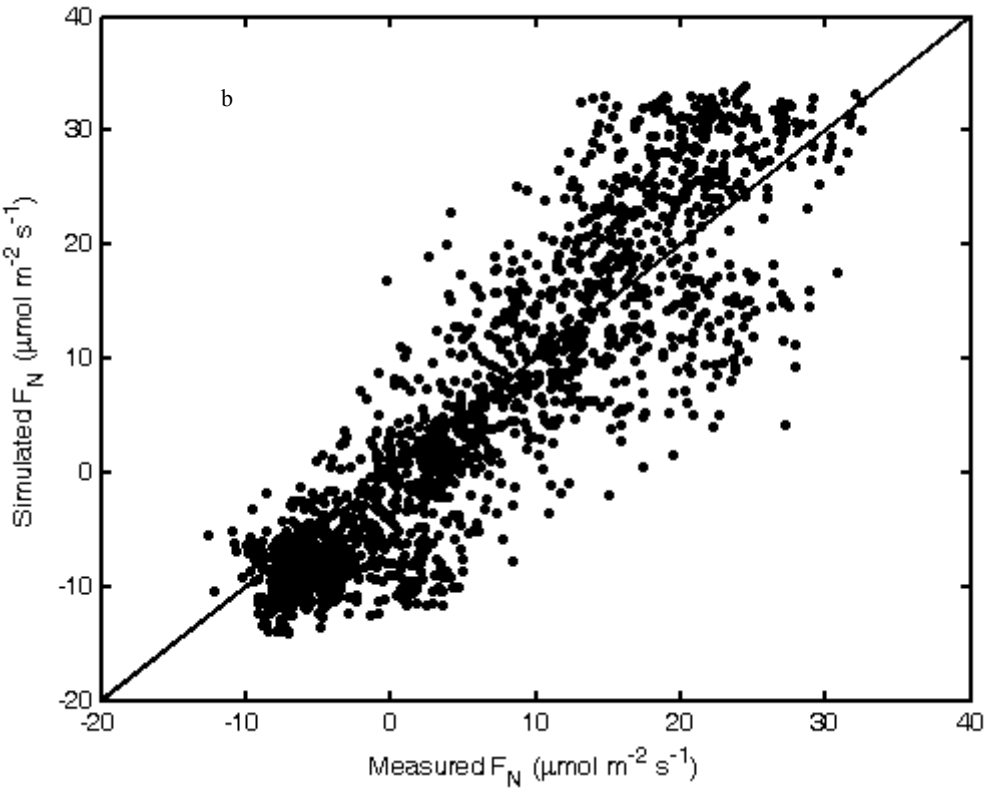


图 5.3 净生态系统 CO_2 交换(F_N)的模拟值和观测值的时间序列(a)和 1:1 图(b)

Figure 5.3 Time series (a) and 1:1 plot (b) for the simulated and observed net ecosystem CO_2 exchange (F_N)

0.21m^3 m^{-3}。观测表明大豆生态系统对土壤湿度很敏感，而模型未能完全捕捉到这一特点，而且在土壤湿度很低的情况下，模型失灵。要改进模型，我们需要一个更好的参数化方案来模拟光合作用对根区土壤湿度的响应。

5.2 叶片水和蒸腾水的 ^{18}O 含量

5.2.1 叶片水的 ^{18}O-H_2O 含量模拟

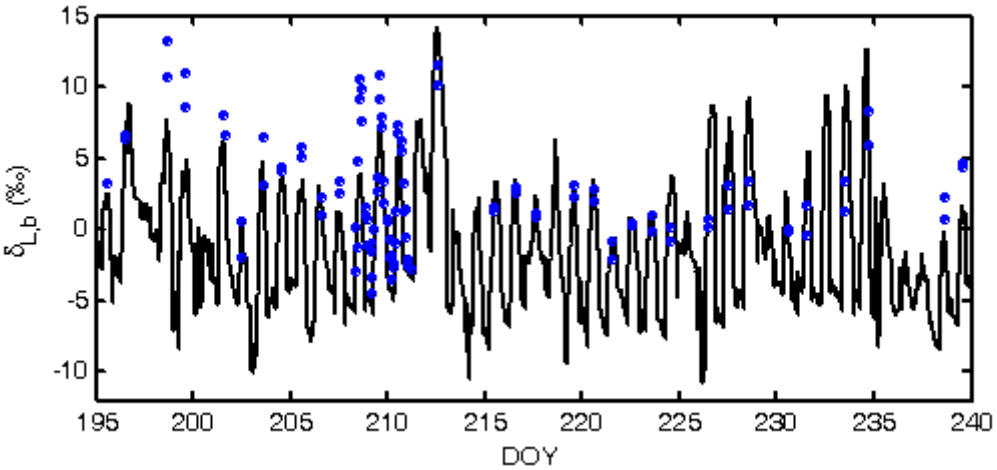


图 5.4 叶片体积水 ^{18}O-H_2O 含量($\delta_{L,b}$)的模拟值(实线)和观测值(圆点)的时间序列

Figure 5.4 Time series of the simulated (solid line) and observed (dots) ^{18}O-H_2O composition of the bulk leaf water ($\delta_{L,b}$)

图 5.4 为叶片体积水同位素含量($\delta_{L,b}$)的模拟值和观测值时间序列。对于中午平均值(10:00 至 15:00)，$\delta_{L,b}$ 的观测值变化范围为-1.5 到 11.9 ‰，模拟值变化范围为-5.6 到 14.2 ‰。$\delta_{L,b}$ 模拟值和观测值的 I 为 0.78，RMSD 为 2.9‰，ME 为－0.1‰。DOY 212 之前，大部分中午 $\delta_{L,b}$ 的模拟值偏低，DOY 224 至 234 的中午 $\delta_{L,b}$ 模拟值偏低。DOY 215 至 223 的 $\delta_{L,b}$ 较合理。加密观测时期(DOY 208 到 210)，模型对 $\delta_{L,b}$ 的日变化模拟较好，而模拟振幅偏低。

图 5.5 揭示了稳态假设和 L_{eff} 取值对 $\delta_{L,b}$ 模拟的影响。同时也将 *Farquhar and Cernusak* 方法对 $\delta_{L,b}$ 的计算值与观测值进行了对比。稳定状态的模拟值(加号，图 5.5a)与观测值的一致性指数 I 为 0.76，RMSD 为 3‰，ME 为 0.1‰。因此非稳定状态(圆点)对模拟略有改进。如果依据文献将 L_{eff} 取值为 15 mm，则模拟值(乘号)与观测值差异较大。图 5.5b 对比了整个模拟阶段非稳态假设和稳态假设对 $\delta_{L,e}$ 的计算，大部分点偏离 1 比 1 线，表明除了有结露的夜间外，非稳态和稳态假设的预测存在差异。结露时，二者的预测值相同。图 5.5c 为非稳态和稳态假设对 $\delta_{L,e}$ 的预测值之差的日变化。从 07:30 到 14:30 LST，差值为负，最大负值出现在 10:00 左右，为-0.6 ‰，表明 δ_E 比水源(茎杆水) δ_x 低，^{18}O-H_2O 在叶片水中富集。从 15:30 到 06:30 LST，差值为正，最大值为 1.3 ‰，出现在 19:00，表明 δ_E 大于 δ_x。

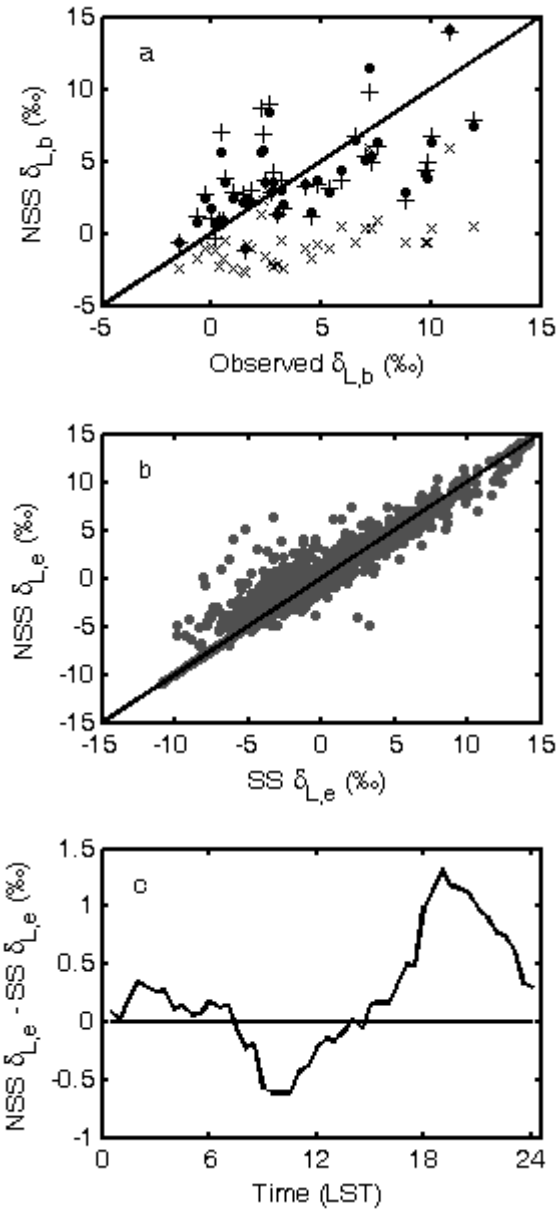


图 5.5 叶片水的 ^{18}O-H_2O 含量比较

Figure 5.5 Comparison of the ^{18}O-H_2O composition of leaf water

a, $\delta_{L,b}$ 模拟值和观测值对比(圆点－非稳定状态(NSS)和 L_{eff} = 1×10^{-8} mm; 加号，稳定状态(SS)和 L_{eff} = 1×10^{-8} mm；乘号，NSS 和 L_{eff} = 15 mm)Prediction of $\delta_{L,b}$ versus the observed $\delta_{L,b}$ (dots, non-steady state (NSS) and L_{eff} = 1×10^{-8} mm; plus signs, steady state (SS) and L_{eff} = 1×10^{-8} mm; crosses, NSS and L_{eff} = 15 mm); b, $\delta_{L,e}$ 的 NSS 和 SS 模拟值 NSS versus SS prediction of $\delta_{L,e}$；c, $\delta_{L,e}$ 的 NSS 和 SS 模拟值以及二者之差的日变化 Diurnal composite variations of the NSS and SS prediction of $\delta_{L,e}$ and their difference

5.2.2 蒸腾水的 ^{18}O-H_2O 含量模拟

图 5.6 为 δ_E 模拟值和观测值的日变化，包含了夜间结露情况。在此提醒读者，SiLSM 忽略了土壤蒸发对 ET 的贡献，因为土壤蒸发在 LAI>2 时的影响很小，并且趋于降低 δ_E。在整个研究阶段，δ_x 变化范围为-5.5‰ 至-8.4 ‰，平均值为-7.4 ‰。日间(从 08:00 至 18:00 LST)，δ_E 模拟值变化范围为-9.6 到 -4.3 ‰，观测值为-7.3 到-2.8 ‰，模拟值与观测值的一致性指数 I 为 0.28，RMSD 为 7.3‰，ME 为 1.5‰。夜间(从 18:30 至次日 07:30LST)，δ_E 的模拟值和观测值的 I 为 0.25，RMSD 为 38.0‰，ME 为 5.0‰。模拟值和观测值在 20:00 和 21:00 LST 达到日峰值，分别 11.6 ‰ 和 6.9 ‰. 从

18:30 到 07:30 LST，δ_E 的观测值紊乱，最小值为-24.9 ‰，δ_E 的模拟值未低于-5.4 ‰。δ_E 与 δ_x 的观测值之间的差异为叶片水同位素交换的非稳态提供了证据。

图 5.6 表明将 *Farquhar* 和 *Cernusak* 模型扩展到整个冠层尺度后，能较好的捕捉到无结露时段(10:00 to 18:00 LST)δ_E 的时间变化。在 19:00 和 09:00 LST 之间，δ_E 的观测值包含结露的影响。模型在结露时段模拟效果不理想。

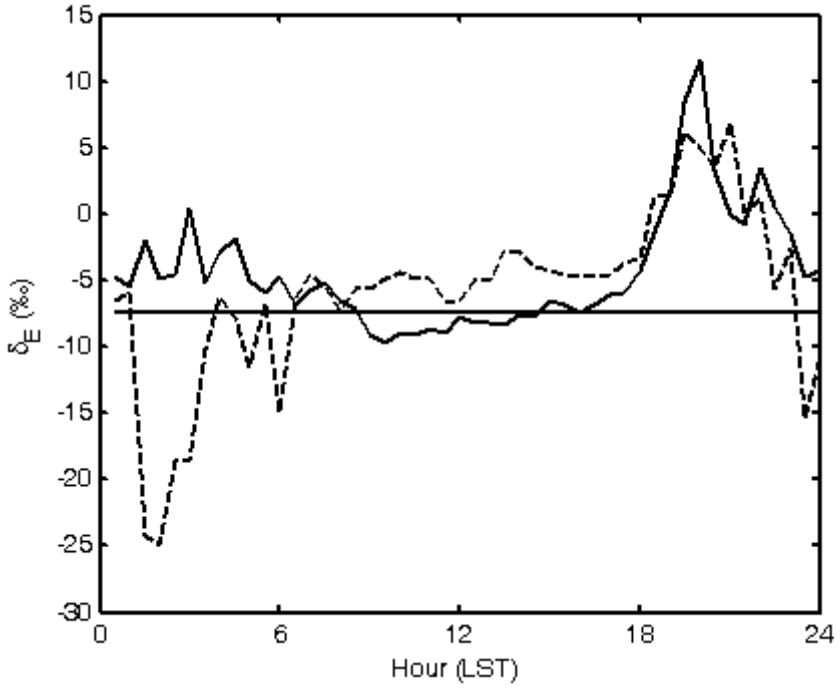


图 5.6 蒸散的 ^{18}O-H_2O 含量 δ_E 模拟值(实线)与观测值(划线)的日变化，直实线为 δ_x 的季节均值。

Figure 5.6 Diurnal composite of ^{18}O-H_2O composition of simulated (solid line) and measured (dashed line) evapotranspiration δ_E, the straight solid line is the seasonal mean δ_x

5.3 ^{18}O-CO_2 同位素通量

图5.7为同位素通量的模拟值和观测值时间序列。图中蓝点为较好风浪区（即风向在90°至270°之间，而且观测之前的2.5小时内无降水）观测值，红点为较差风浪区（即风向小于90°或大于270°）观测值。日间，较好风浪区的最大观测值为511 μmol m^{-2} s^{-1}，最大模拟值为948 μmol m^{-2} s^{-1}。夜间，模拟值比观测值高。

图 5.8 为生态系统 ^{18}O-CO_2 同位素通量与观测值的 1 比 1 图，其中红点为较差风浪区，蓝点为较好风浪区。对于所有观测值，与对应时段模拟值的一致性指数 I 为 0.73，RMSD 为 204μmol m^{-2} s^{-1}，ME 为 126μmol m^{-2} s^{-1}。对于较好风浪区，I 为 0.69，RMSD 为 222 μmol m^{-2} s^{-1}，ME 为 143 μmol m^{-2} s^{-1}。而对于较差风浪区，I 为 0.77，RMSD 为 187 μmol m^{-2} s^{-1}，ME 为 111 μmol m^{-2} s^{-1}。在此对比结果中，我们无法判断风浪区好坏对同位素通量的影响。

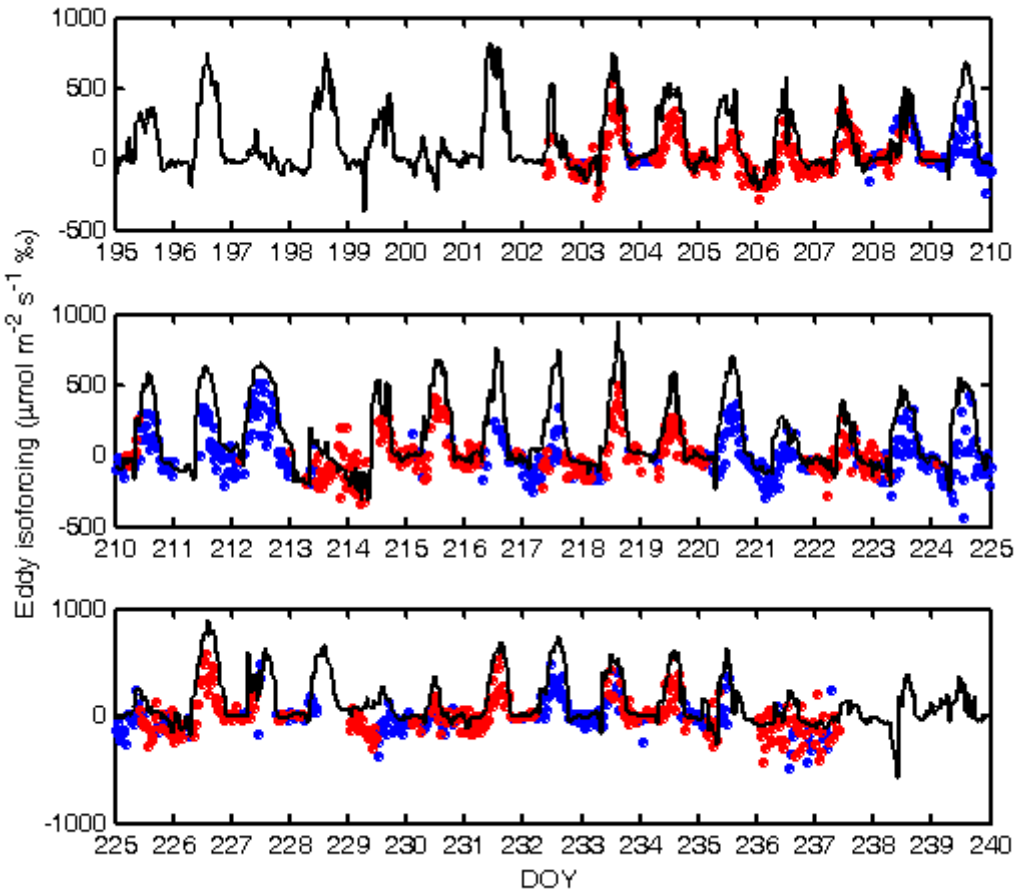


图 5.7 生态系统 ^{18}O-CO_2 同位素通量时间序列

Figure 5.7 Time series of the ecosystem eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing

实线—模拟值 Solid line- simulation; 红点—较差风浪区的观测值 Red dots- observations with poor fetch; 蓝点—较好风浪区的观测值 Blue dots- observations with good fetch

图 5.9 为 ^{18}O-CO_2 同位素通量 $C_a(\overline{w'\delta'})$ 的日变化，模拟值偏高。日间同位素通量的观测值和模拟值均为正，即生态系统向大气贡献 ^{18}O-CO_2，模拟值的日峰值为 434 μmol m^{-2} s^{-1} ‰，观测值的日峰值为 202 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ 。夜间，同位素通量为负，模拟值的最小值为-31 μmol m^{-2} s^{-1} ‰，观测值的最小值为-93 μmol m^{-2} s^{-1} ‰。

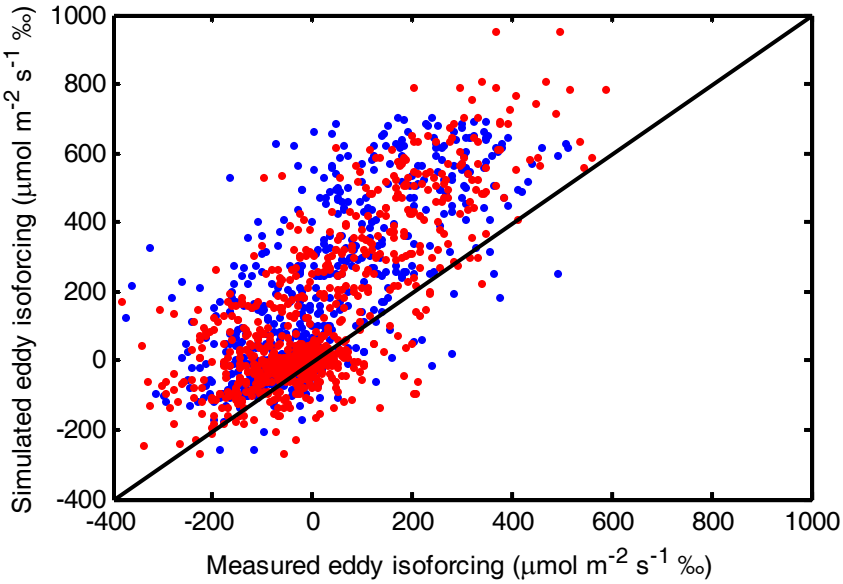


图 5.8 生态系统 $^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素通量观测值和模拟值的 1:1 图

Figure 5.8 1:1 plot of the measured and simulated ecosystem eddy $^{18}O\text{-}CO_2$ isoforcing

红点—较差风浪区的观测值 Red dots- observations with poor fetch; 蓝点—较好风浪区的观测值 Blue dots- observations with good fetch

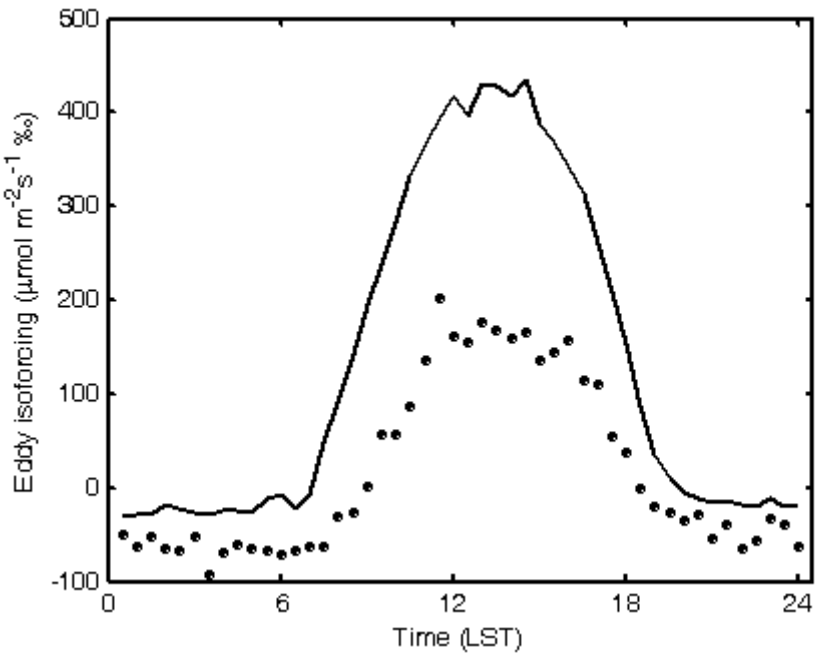


图 5.9 生态系统 $^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素通量的日组分

Figure 5.9 Diurnal composite of the ecosystem eddy $^{18}O\text{-}CO_2$ isoforcing

实线为模拟值 Solid line represents model results；圆点为观测值 Dots represent observation

第六章 敏感性分析

对模型进行了三组敏感性分析(表 6.1)。第一组为两个无约束模型参数：叶片 CO_2 水合效率(θ_{eq})和土壤 CO_2 扩散阻力(r_s^c)。第二组敏感性分析是检验 SiLSM 子模型如何处理那些主要交换过程：能量平衡闭合性、非稳态效应及动力学分馏系数。第三组分析旨在确定同位素驱动力对驱动变量的敏感性：大气 CO_2 浓度、空气温度、空气湿度、冠层高度、风速和土壤湿度等。

表 6.1 模拟 $C_a(\overline{w'\delta'})$ 日峰值的敏感性分析

Table 6.1 Sensitivity analysis of the modeled diurnal peak value of $C_a(\overline{w'\delta'})$

		变化	$C_a(\overline{w'\delta'})$ 日峰值 (μmol m^{-2} s^{-1} ‰)	敏感度
参数	θ_{eq}	-33%	275	-37%
		+33%	594	37%
	r_s^c	-50%	378	-13%
		+100%	466	+7%
过程		未强迫能量平衡闭合	396	-9%
		稳态条件下计算 $\delta_{L,e}$	443	2%
		忽略湍流扩散	888	+105%
驱动变量	C_a	+100%	890	+105%
	T_a	+1 K	354	-18%
	RH	+0.02	379	-13%
	h	-50%	317	-27%
	u_m	-10%	402	-8%
	θ	-10%	359	-17%

注：采用默认参数，模拟的日峰值为 434 μmol m^{-2}s^{-1} ‰ For reference, the modeled diurnal peak value with default parameters is 434 μmol m^{-2}s^{-1} ‰；观测日峰值为 202 μmol m^{-2} s^{-1} ‰. Observed peak value is 202 μmol m^{-2} s^{-1} ‰

6.1 模型参数

6.1.1 CO_2 水合程度

白天 CO_2 同位素通量对 θ_{eq} 的取值非常敏感，夜间变化不大。SiLSM 中采用的 θ_{eq} 默认值为 0.75 [*Gillon and Yakir*, 2000a]。如果我们将 θ_{eq} 改为 0.5 (相对变化为-33%)或

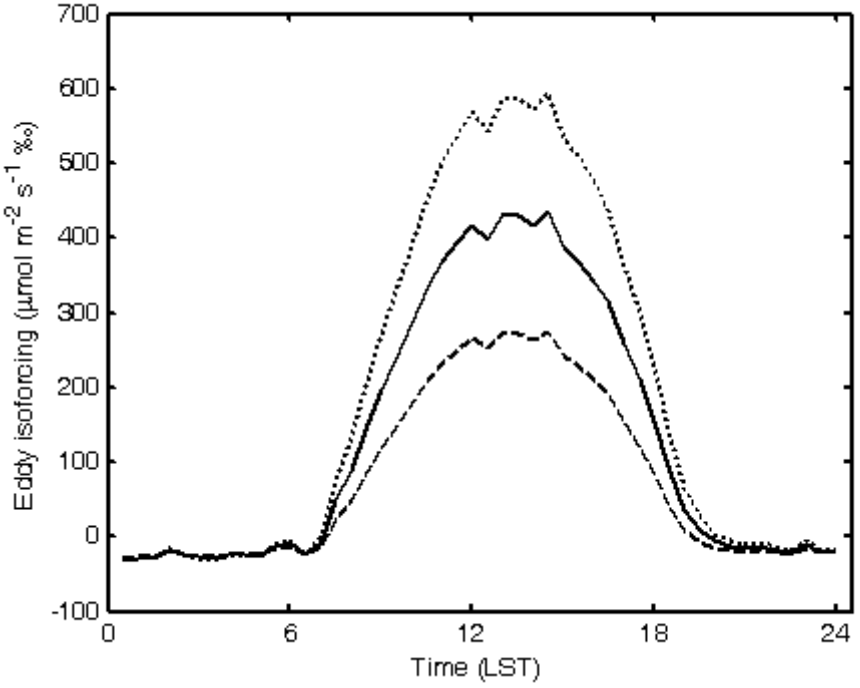


图 6.1　^{18}O-CO_2 同位素通量对 CO_2 水合程度(θ_{eq})的敏感性

Figure 6.1　The sensitivity of eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to CO_2 hydration extent (θ_{eq})

实线 Solid line: θ_{eq} =0.75 (模型默认值 original model value)；划线 Dashed line: θ_{eq} =0.5; 虚线 Dotted line: θ_{eq} =1.0

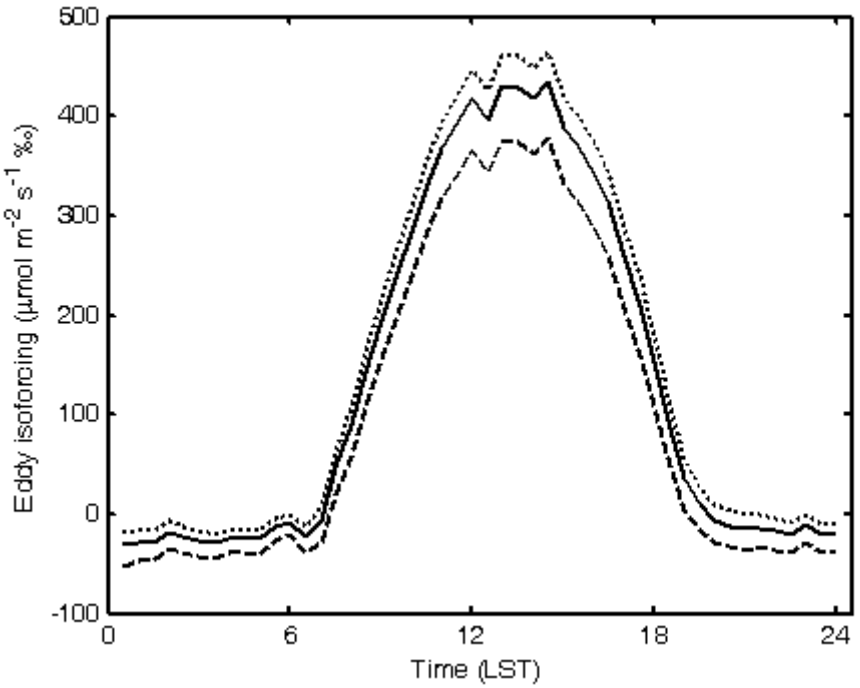


图 6.2　^{18}O-CO_2 同位素通量对土壤阻力的敏感性

Figure 6.2　The sensitivity of the eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to soil resistance

实线 Solid line: r_s^c = 800 s m^{-1}(模型初始值 original model value); 划线 Dashed line: r_s^c =400 s m^{-1}，虚线 Dotted line：r_s^c =1600 s m^{-1}

1.0 (相对变化为+33%)，则同位素通量的日峰值分别变为 275 (相对变化为-37%) 和 594 μmolm^{-2}s^{-1} ‰ (相对变化为+37%) (表 6.1；图 6.1)。夜间模拟值的变化较小(图 6.1)，最小值分别为-30 (θ_{eq}＝0.5)和-31 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (θ_{eq}＝1)，而 θ_{eq} 默认值的模拟结果为-31 μmol m^{-2} s^{-1} ‰。模型对 θ_{eq} 的敏感性可能是模型预测值偏高的主要原因(图 5.7 至 5.9，第七章)。

6.1.2 土壤阻力

对比而言，日间同位素通量模拟值对 r_s^c 的敏感度较低，但是夜间也较敏感。r_s^c 越大，^{18}O-CO_2 同位素通量计算值越大。如果我们将 r_s^c 增加一倍，从 800 s m^{-1} (默认值)升高为 1600 s m^{-1}，则 $C_a(\overline{w'\delta'})$ 的日最大值和最小值变为 466 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为+7%)和-20 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为+38%)。若将 r_s^c 取值为默认值的一半(400 s m^{-1})，则上述值降为 378 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为-13%)和-52 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为-65%)。较高的 r_s^c 增加土壤动力学分馏系数 $\varepsilon_{k,s}^c$，降低整个生态系统同位素通量。但是，土壤对扩散的阻力增加，导致土壤空气的 CO_2 浓度(C_s) 升高，补偿了这一下降(公式 3.59)。从而，对同位素通量的总体影响较小。

6.2 子模型不同处理方法

6.2.1 能量平衡闭合性

在 LSM 子模型中，首先强迫能量平衡闭合，调整 LE 和 H 的观测值，然后用调整值进行参数最优化。如果用原始观测值，θ 低于 0.21 时，土壤湿度公式(公式 3.16)中的系数 b_1 和 b_2 从-5.8 和 24.9 变为-5.4 和 19.3，θ 高于 0.21 时，从-1.5 和 0.5 变为-1.0 和-1.5。气孔公式中的两个参数 D_0 和 a_1 从 0.44 kPa 和 16.2 变为 0.32 kPa 和 8.1。^{18}O-CO_2 同位素通量的各个时段所受影响不同，09:00 至 16:00 同位素通量值降低，其中日峰值降为 396 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为-9%)，且出现时间晚 1 小时；其他时间，同位素通量值升高，其中夜间最低值升为-26 μmolm^{-2}s^{-1}‰ (相对变化为+19%) (图 6.3)。

6.2.2 非稳态效应

在 $H_2{}^{18}O$ 子模型中，稳态假设使得 ^{18}O-CO_2 同位素通量略有升高，至 443 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (+2%)。与非稳态假设计算结果相比，峰值的发生时间提前(约 1.5 小时)(图 6.4)。这种位向偏移与 $\delta_{L,e}$ 的稳态和非稳态模拟的差异(图 5.5c)一致。从 07:30 到 14:30 LST，稳态假设对同位素通量的预测值比非稳态假设预测值高，这是由于 $\delta_{L,e}$ 的稳态值高于非稳态值。从 15:00 到 07:00 LST，情况相反，夜间最小值为-36 μmolm^{-2}s^{-1}‰ (-14%)。尽管同位素通量的峰值变化不大，但忽略非稳态情况会在计算 δ_a^c 时产生误差。

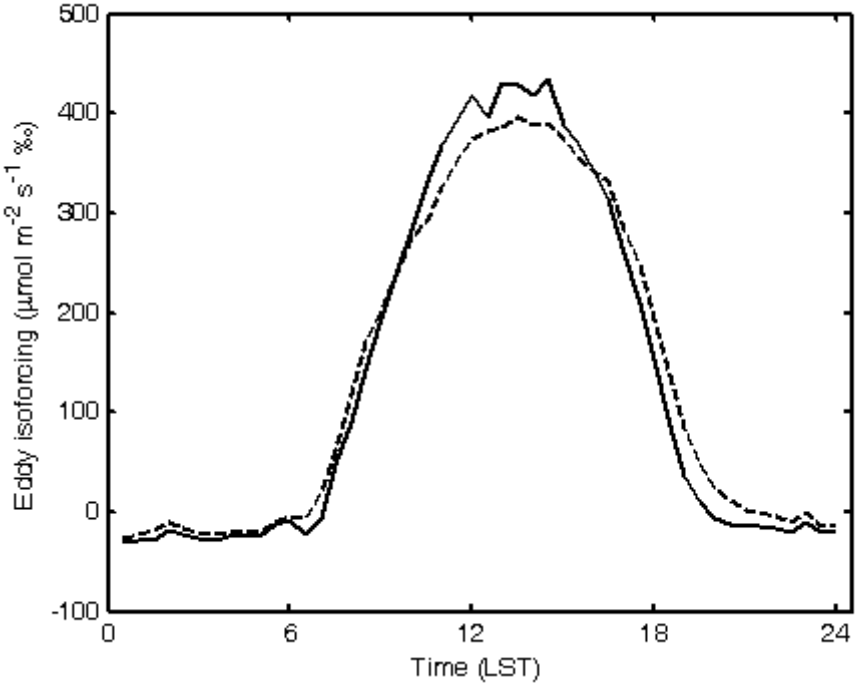


图 6.3　^{18}O-CO_2 同位素通量对能量平衡闭合的敏感度

Figure 6.3　The sensitivity of the eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to energy balance closure

实线—原始模型结果 Solid line- original model result；划线—未强迫能量平衡闭合的模型结果 Dashed line- result without forcing energy balance closure

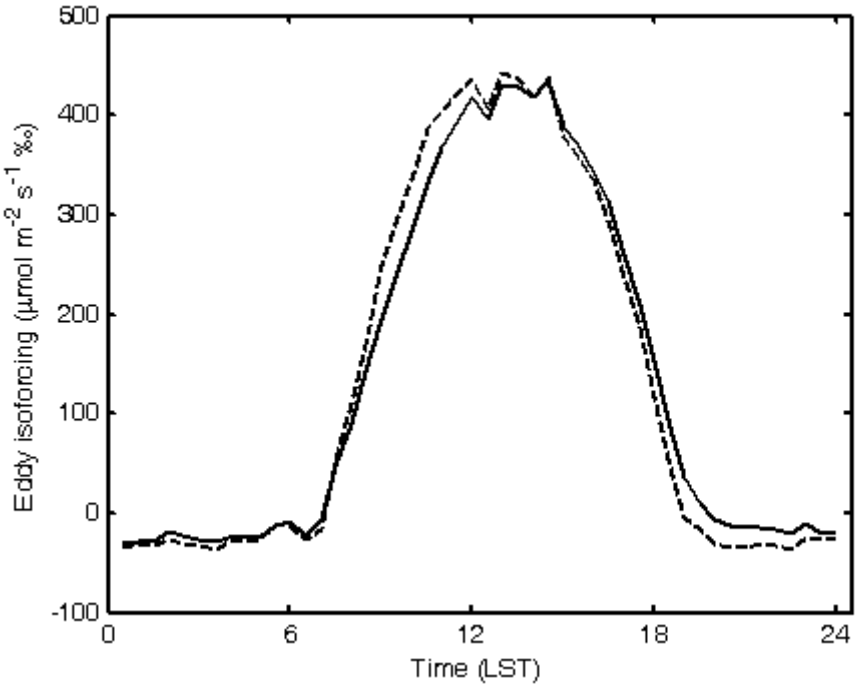


图 6.4　^{18}O-CO_2 同位素通量对非稳定状态的敏感性。

Figure 6.4　The sensitivity of the eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to non-steady state.

实线—非稳定状态(原始模型结果) Solid line- Non-steady state (original model result)；划线—稳定状态 Dashed line- Steady state

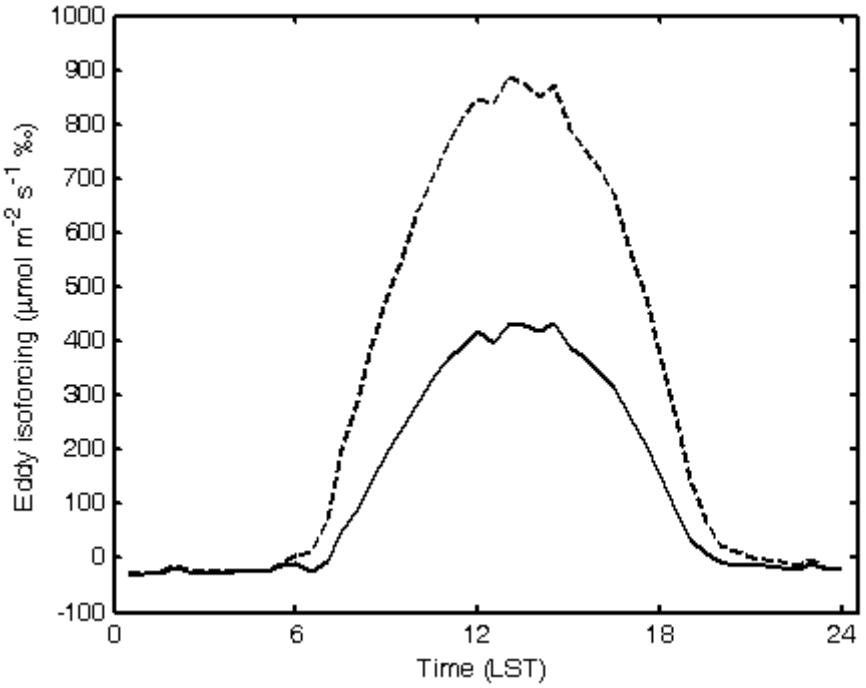


图 6.5 ^{18}O-CO_2 同位素通量对动力学分馏系数的敏感性

Figure 6.5 The sensitivity of the eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to kinetic fractionation factors

实线—考虑空气湍流扩散项的原模型结果 Solid line- the original model result considering air turbulent diffusion；划线—不考虑空气湍流扩散作用的结果 Dashed line- the results without air turbulent diffusion

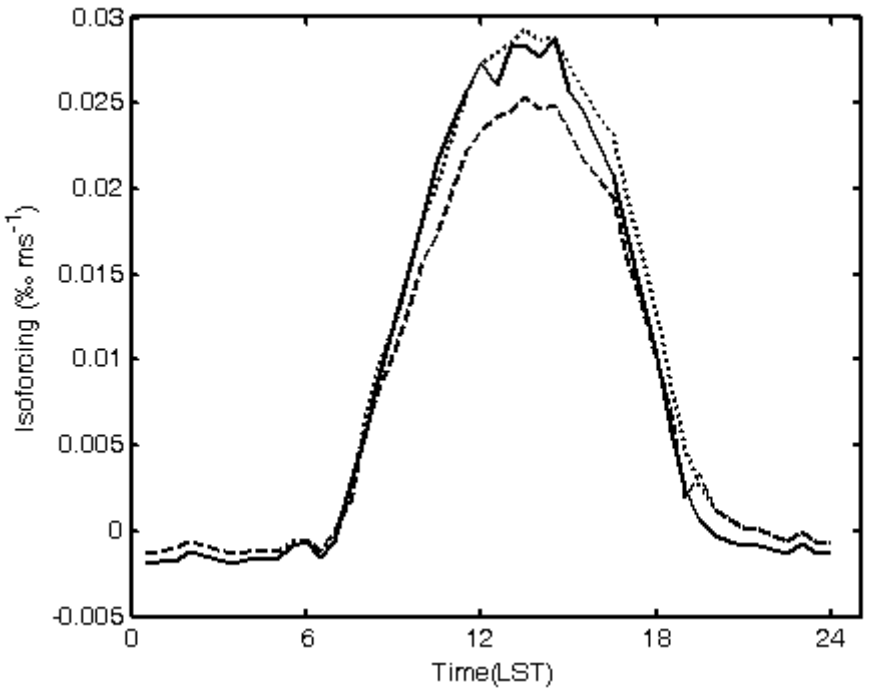


图 6.6 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力 $\overline{w'\delta'}$ 对大气 CO_2 浓度升高的敏感性

Figure 6.6 The sensitivity of ^{18}O-CO_2 isoforcing $\overline{w'\delta'}$ to enhanced atmospheric CO_2 concentratin

实线－原始模型结果 Solid line- original model result；虚线－CO_2 浓度倍增结果 Dotted line- doubling CO_2 concentration；划线－CO_2 倍增但 F_c 维持原模拟值不变 Dashed line- doubling CO_2 concentration but with F_c fixed to original model result

6.2.3 动力学分馏系数

生态系统尺度上，动力学分馏效应与分子扩散和湍流扩散有关。以往的研究都认为空气湍流会使动力学效应减弱，而 *Lee* 等[2009]的研究表明，湍流扩散会加强冠层的动力学分馏效应。本文在计算动力学分馏效应时包含了湍流扩散的作用。如果我们将空气湍流扩散项去除，计算得到的同位素通量将比原模型结果增加 105%，日峰值达到 888 μmol m^{-2} s^{-1} ‰，使模拟结果更加偏离观测值；夜间湍流扩散很弱，影响很小。由此可见，在动力学分馏系数的计算中加入空气湍流扩散项是必要的。

6.3 驱动因子

6.3.1 大气 CO_2 浓度

C_a倍增使得$C_a(\overline{w'\delta'})$升高到890 μmol m^{-2} s^{-1} ‰，相对于原始模型结果增加了+105%，但是同位素驱动力$\overline{w'\delta'}$却升高很小，从原始的0.0288 ‰ms^{-1}升高为0.0294‰ms^{-1}，仅增加了2%(图6.6，更多讨论见7.3)。*Lee*等[2009]认为计算大气^{18}O-CO_2收支的适合边界条件是$\overline{w'\delta'}$，而非$C_a(\overline{w'\delta'})$。若强迫$F_c$维持原模型的计算值，不随$C_a$变化而变化，则$\overline{w'\delta'}$日峰值降低为0.0254‰ ms^{-1}，升高12%。

6.3.2 空气温度和相对湿度

T_a升高使得同位素通量普遍降低。T_a 升高 1K，$C_a(\overline{w'\delta'})$日峰值从原始模型结果的 434μmol m^{-2} s^{-1} ‰降低到 354 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (-18%)，出现时间不变。日最小值从原始结果的-31μmol m^{-2} s^{-1}‰降低为-53 μmol m^{-2} s^{-1}‰，相对变化为-70%。

RH 升高 0.02，从 08:00 至 15:30，同位素通量降低，其中日峰值(14:30)降低到 379 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (相对变化为-13%)，日峰值出现时间没有变化。其他时段同位素通量升高，夜间$C_a(\overline{w'\delta'})$最低值升高为-25μmol m^{-2} s^{-1}‰(相对变化为 19%)。

6.3.3 冠层高度和风速

冠层高度或风速降低，都导致白天 ^{18}O-CO_2 同位素通量下降，夜间变化较小，主要原因是空气动力学阻力和边界层阻力受到影响，进而影响动力学分馏系数和胞间 CO_2 浓度的计算，而这些影响在夜间则不明显。图 6.9 显示冠层高度减半，^{18}O-CO_2 同位素通量计算值降低为 316 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (-27%，表 6.1)。而图 6.10 风速降低 10%，同位素通量日峰值降低为 402 μmol m^{-2} s^{-1} ‰(-8.9%)。

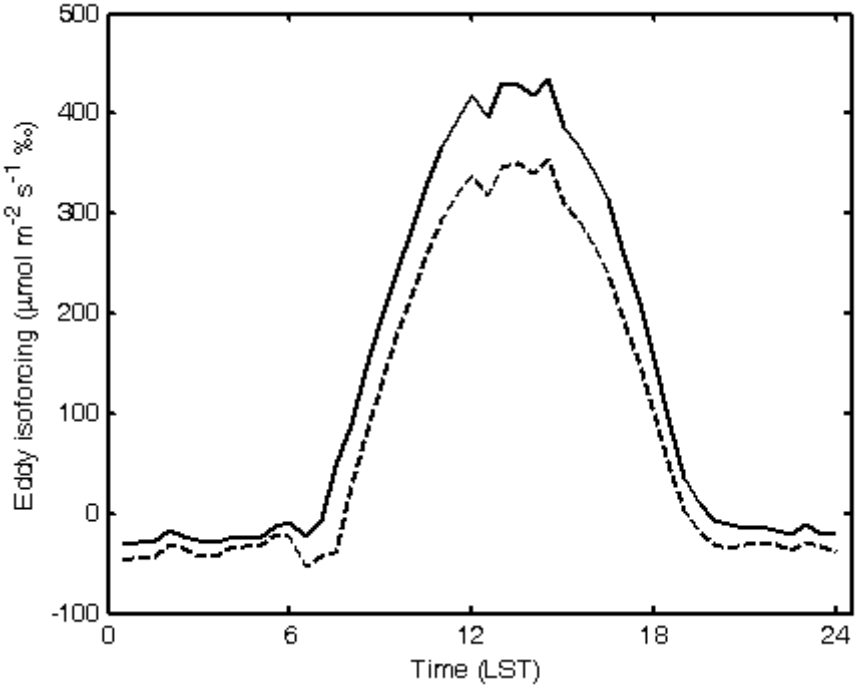


图 6.7 $^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素通量对空气温度的敏感性

Figure 6.7 The sensitivity of the eddy $^{18}O\text{-}CO_2$ isoforcing to air temperature

实线-原模型结果 Solid line-original model result; 划线-空气温度升高 1K Dashed line-air temperature increased by 1K

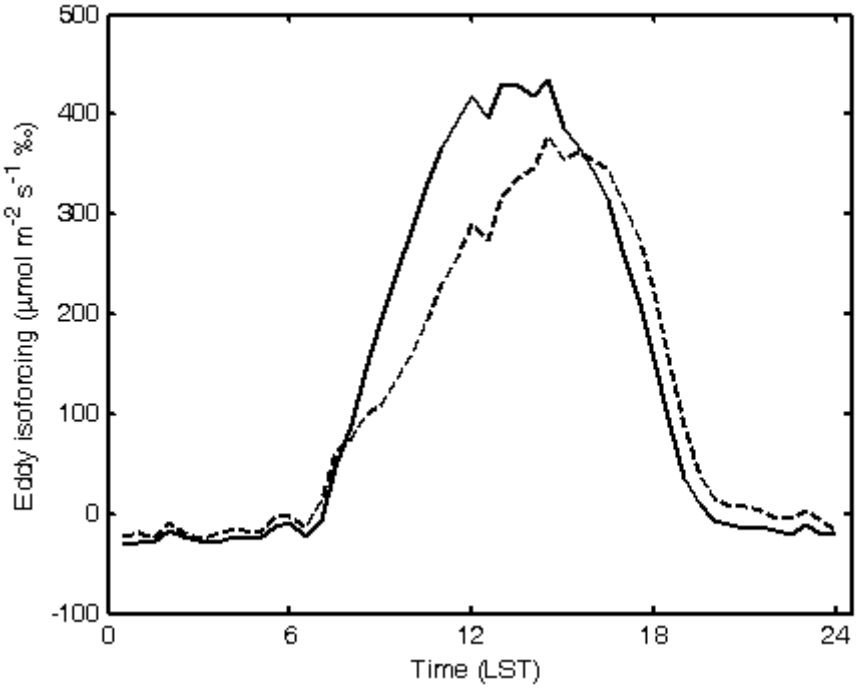


图 6.8 $^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素通量对空气湿度的敏感性

Figure 6.8 The sensitivity of eddy $^{18}O\text{-}CO_2$ isoforcing to atmospheric relative humidity

实线- 原模型结果 Solid line- original model result；划线- RH 增加 0.02 Dashed line- increased RH by 0.02

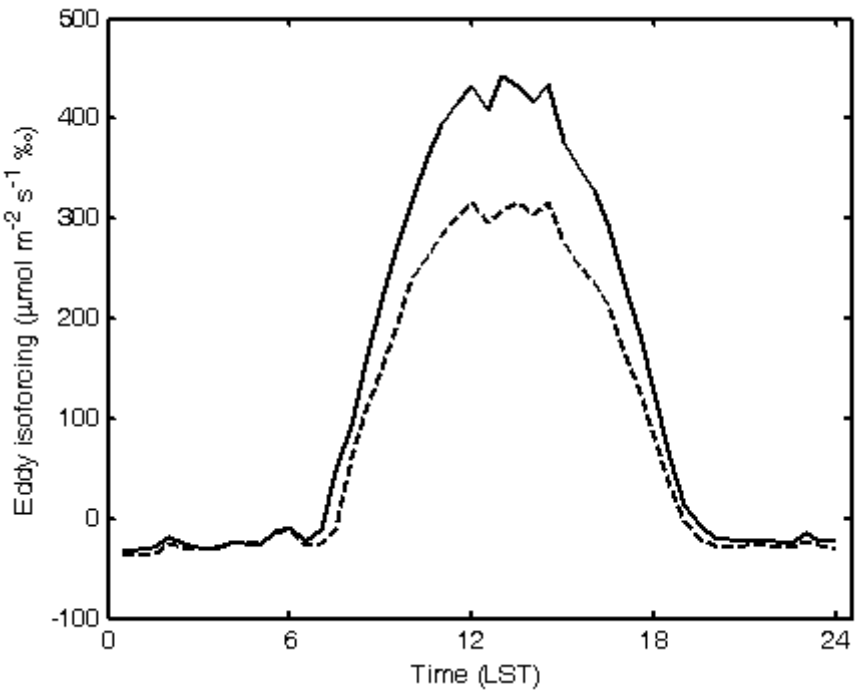


图 6.9　^{18}O-CO_2 同位素通量对冠层高度的敏感性

Figure 6.9　The sensitivity of eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to canopy height

实线－原模型结果 Solid line- original model result；划线－冠层高度减半 Dashed line- half canopy height

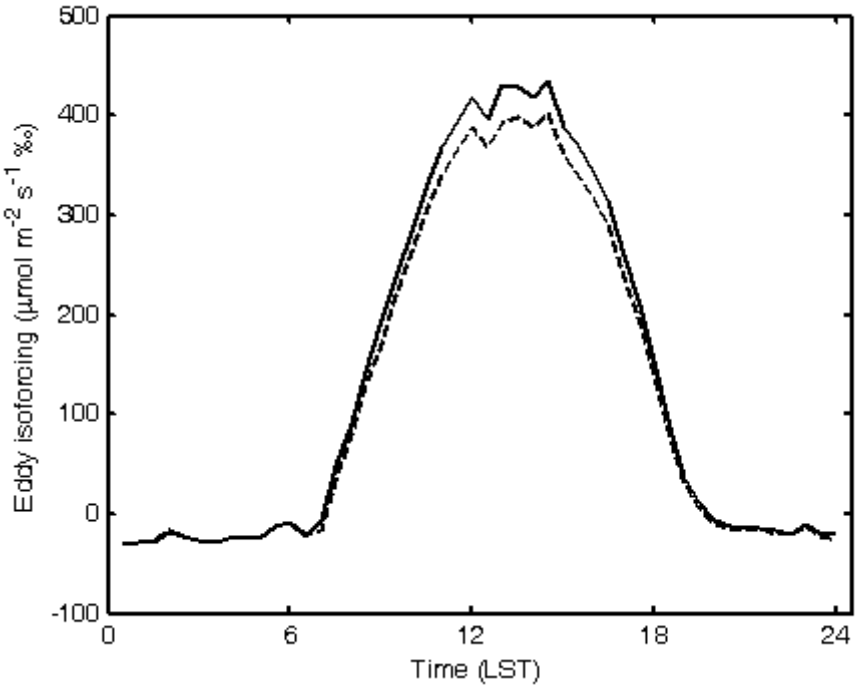


图 6.10　^{18}O-CO_2 同位素通量对风速的敏感性

Figure 6.10　The sensitivity of eddy ^{18}O-CO_2 isoforcing to wind speed

实线- 原模型结果 Solid line- original model result；划线- 风速降低 10% Dashed line- reduce wind speed by 10%

6.3.4 土壤湿度

土壤湿度降低 10%，白天(06:00 至 17:00)，$^{18}O\text{-}CO_2$ 同位素通量下降，其中日峰值降低为 359 μmol m^{-2} s^{-1} ‰(-17%)；其他时段，同位素通量上升，夜间最低值上升为 -21 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (+32%)。

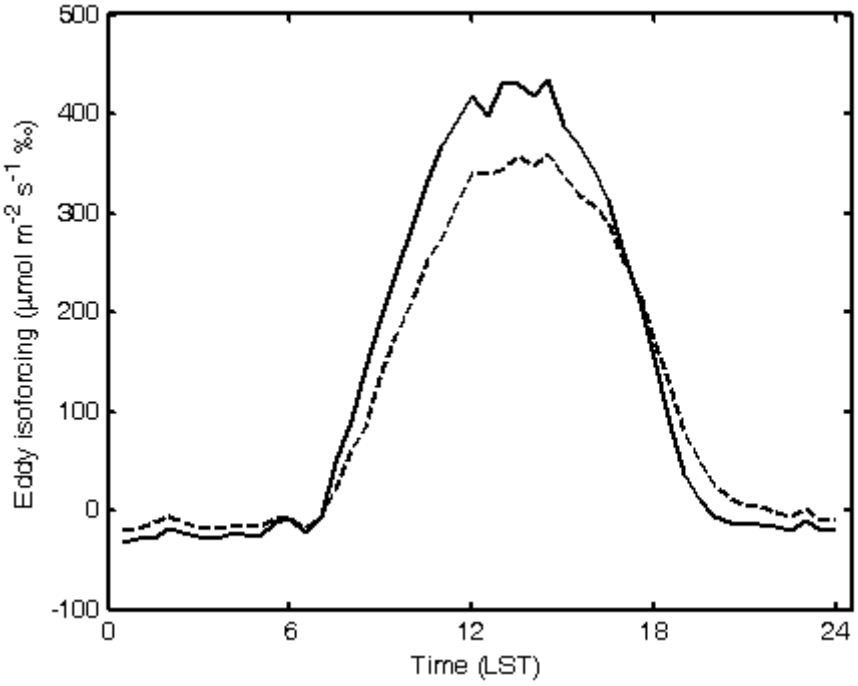


图 6.11　土壤湿度对同位素通量计算的影响

Figure 6.11　The sensitivity of the eddy $^{18}O\text{-}CO_2$ isoforcing to soil moisture

实线-原模型结果 Solid line- original model result; 划线-土壤湿度降低 10% Dashed line- reduced soil moisture by 10%

第七章 讨论和结论

7.1 讨论

7.1.1 能量不平衡对模型的影响

涡度相关观测中普遍存在的能量平衡不闭合问题导致 LSM 模型的校准存在重要问题[*Wilson et al.*, 2002]。由于 LSM 模型通常基于能量收支守恒原理，所以依据通量的观测时间序列对 *LE*、*H* 和 F_N 的计算进行参数最优化，会产生错误参数。例如，若以最好的模拟 *LE* 为目标，对参数 D_0、a_1、b_1 和 b_2 进行训练，则模拟的 *H* 值远高于(未调整)观测值。为了满足能量守恒，模型被迫将丢失能量分配给 *H*，导致 *H* 计算中的正偏差。若假设涡度相关方法能精确观测 Bowen 比，我们可以用调整后的 *H* 和 *LE* 训练 LSM，这一方法在逻辑上是正确的。例如，*H* 模拟的 RMSD 为 46 W m^{-2}，一致性指数为 0.78。*Aranibar* 等[2006]的研究也得到类似结论。因此，强迫能量平衡闭合能改进 LSM 模型性能。

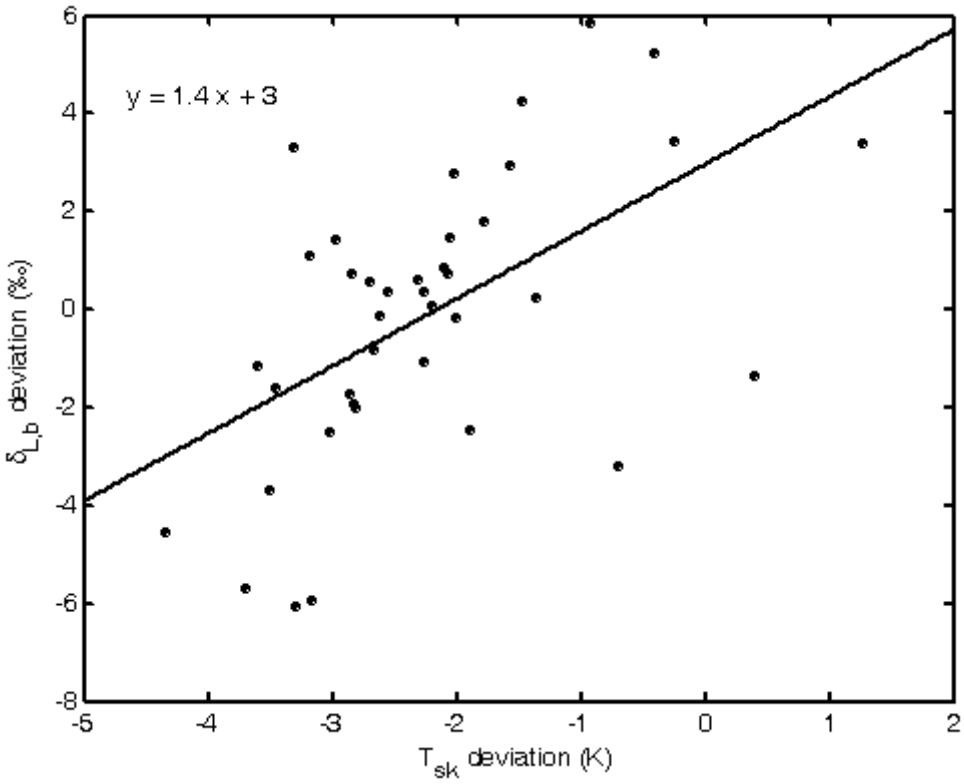


图7.1 模型对 $\delta_{L,b}$ 和 T_{sk} 模拟误差的关系

Figure 7.1 Relationship between model errors in $\delta_{L,b}$ and T_{sk}

$R^2 = 0.31$, 实线为最佳线性回归拟合 Solid line is a best fit regression with the equation shown

能量平衡闭合性对同位素通量计算的影响则没有那么直接。若用未调整的通量观测值对 LSM 模型进行训练，则计算的同位素通量日峰值比强迫能量平衡闭合的原始模型结果低 9%(表 1)。两个相反的过程导致这一敏感度较小。一方面，如果用初始 H 和 LE 的观测值训练 LSM，则整个模拟阶段(DOY 195-240)中，H 中午(10:00 至 15:00)平均模拟值从默认的 29 W m^{-2} 增加到 127 W m^{-2}，中午 LE 平均模拟值从原始的 372 W m^{-2} 减小到 264W m^{-2}，而 T_{sk} 从初始的 299.9 K 变为 301.6 K。T_{sk} 较高，则相对湿度 RH_i 较低，从而 $\delta_{L,e}$ 较高。而 LE 降低意味着较高的冠层阻力，动力学系数(ε_k^c 和 ε_k^w)增加。$\delta_{L,e}$ 和冠层动力学系数升高都增加公式 3.55 方括号中各项之和，趋于增加同位素通量。另一方面，冠层 CO_2 通量 F_c 由原始的-24 μmol m^{-2} s^{-1} 变为-23 μmol m^{-2} s^{-1}。日间，由于光合作用，$F_c < 0$，$C_i - C_a < 0$，负值较小的 F_c 会部分抵消 $\delta_{L,e}$ 和 ε_k^c 产生的同位素驱动力增强。

图 7.1 进一步显示了叶片水的同位素含量计算值对 T_{sk} 误差的敏感性。如图所示，$\delta_{L,b}$ 的模拟值(非稳定状态)和观测值之差与 T_{sk} 的模拟值和观测值之差有显著相关性，$R^2 = 0.31$。在 DOY 212 之前，SiLSM 对 $\delta_{L,b}$ 的模拟值大部分偏高，H 和 T_{sk} 模拟值偏低，而 RH_i 模拟值偏高。DOY 224 至 234，H 的模拟值高于观测值，$\delta_{L,b}$ 的模拟值偏高(图 5.4 和 5.5)。

7.1.2 CO_2 水合程度

根据敏感性分析(表 6.1)，我们发现叶片内 CO_2 水合程度(θ_{eq})和冠层动力学分馏作用是控制 ^{18}O-CO_2 通量的两个最关键的因子。如果在计算动力学系数时忽略湍流作用，同位素通量的模拟值会远高于观测值。但是尽管考虑湍流扩散，同位素通量的模拟值仍然偏高(图 5.7 至 5.9)。敏感性分析显示将 θ_{eq} 的默认值设定为 0.75 可能太高。该默认值取自 *Gillon* 和 *Yakir*[2000a]的研究结果，他们首先测量 CA 离体活性和气体交换，然后用 *Mills* 和 *Urey*[1940]开发的公式计算 CO_2 水合程度。

Cousins 等[2006]的研究表明从 $C^{18}OO$ 判别观测数据推导出的 θ_{eq} 随辐射强度而变化。他们发现野外条件下，野生型 *Flaveria bidentis* 在低辐射条件下(PAR = 150 μmol m^{-2} s^{-1}) θ_{eq} 值为 1.06，高辐射条件下(PAR =2000 μmol m^{-2} s^{-1}) θ_{eq} 值为 0.45。我们的分析也表明野外生长的植物 CO_2 水合程度应该比从 CA 活性和光合通量观测中推导出的值要低得多。如果用中午同位素通量观测值对模型进行优化，得到 θ_{eq} 值为 0.33。

图 5.7 至 5.9 中显示的不一致还有两种解释，但是二者看起来都不可信。第一种解释是 $\delta_{L,e}$ 模拟值偏高。但是，强迫同位素通量一致，需要中午 $\delta_{L,e}$ 比 $\delta_{L,b}$ 观测值低，根据我们对叶片蒸腾富集机制的认识，这是不可信的。第二种解释是同位素驱动力观测的不确定性。本文中采用的同位素通量数据是首次用涡度相关方法直接测量生态系统尺度同位素通量，数据点很紊乱(图 5.7)，而且这种紊乱看起来是随机的。但是基于梯度扩散理论，对同位素通量进行估算，与涡度相关方法测量的一致性很好，这表

明后者的系统误差应该不大[*Welp et al.* 论文准备中]。因此，我们认为对图 5.7 至 5.9 中的不一致的最好解释便是水合效率应该更低。

7.1.3 CO_2 浓度、湿度和温度上升的影响

为了预测未来 CO_2 浓度升高对同位素驱动力的影响，有必要对此进行探讨。敏感性分析表明 CO_2 浓度倍增，同位素驱动力 $\overline{w'\delta'}$ 仅上升 2%。对 CO_2 浓度升高的箱法试验和野外试验表明，CO_2 浓度升高，植物会通过增加气孔阻力来加强光合作用，减少蒸腾[*Anderson et al.*, 2001; *Drake et al.*, 1997; *Long et al.*, 2004; *Maherali et al.*, 2003; *Maherali et al.*, 2002]。在我们的 2×CO_2 敏感性测试中，冠层 CO_2 通量(F_c)的幅度上升 17% (从-24 变为-28 μmol m^{-2} s^{-1}，为 10:00 到 15:00 LST 的平均值)，*LE* 下降 19% (从 372 变为 300 W m^{-2})，冠层阻力(r_c^w)增加 94% (从 1.05 变为 2.04 m^2 s mol^{-1})。同位素驱动力 $\overline{w'\delta'}$ 的变化很小是由于几个相反机制的作用。r_c^w 升高、r_a 降低(由于空气更加不稳定)使得 ^{18}O-H_2O 的动力学分馏系数 ε_k^w 升高 0.2‰，$\delta_{L,e}$ 升高 2.6 ‰，^{18}O-CO_2 动力学分馏系数升高 0.1‰，根据公式 3.55，所有的作用都使得中午冠层同位素驱动力升高。同样地，F_c 幅度增加会增强同位素驱动力。但是，C_i 增强有相反的影响，使得同位素驱动力减少。

我们的分析结果揭示了大豆植株对 CO_2 升高的短期响应。在较长时期内，反向调节和驯化作用会削弱这种短期响应[*Polley et al.*, 2007; *Rasse et al.*, 2005; *Sellers et al.*, 1996]。为了模拟 down-regulation，我们在 CO_2 浓度倍增情况下计算 $\overline{w'\delta'}$ 时强迫 F_c 维持原模型的计算值，允许其他因子(包括 C_i)变化。我们发现中午 $\overline{w'\delta'}$ 下降了 13%。

目前大气温湿度在区域和全球范围内均呈上升趋势，因此有必要探讨这两种环境因子对同位素分馏过程的影响。RH 和 T_a 上升会降低同位素通量，主要是通过降低 $\delta_{L,b}$。RH 上升(+0.02)使得 $\delta_{L,b}$ 中午平均值从 2.8 ‰变为 1.5%。*Welp* 等[2008]也从观测中发现了这种明显的负相关关系。湿度上升，阻力和分馏系数几乎不变。而同位素通量降低到 286 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (-27%)。T_a 上升 1K，同位素通量降低到 314 μmol m^{-2} s^{-1} ‰ (-19%)，这主要是通过增加 RH_i (进而降低 $\delta_{L,e}$)。

7.2 结论

本文建立了简单同位素陆面过程模型(SiLSM)，模拟了陆地和大气之间 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 同位素交换的控制过程。该模型包含了一个标准陆面过程模型 LSM、一个叶片水同位素含量的非稳态理论、冠层动力学分馏系数和一个大气 ^{18}O-CO_2 同位素驱动力的大叶模型。模型驱动因子为冠层参考高度上观测的气象因子。

模型对 ^{18}O-H_2O 的模拟较好，能模拟出无结露情况下 δ_E 的日变化以及中午 $\delta_{L,b}$ 的季节变化。$\delta_{L,b}$ 的模拟误差与 LSM 对冠层表面温度的模拟误差有密切关系。模型最

优化结果表明径向扩散长度 L_{eff} 远低于文献值，原因可能是以前的文献采用的动力学分馏系数(忽略了 r_a 组分)过高，而计算 L_{eff} 时对此进行了补偿。

模型敏感性分析揭示了一些 ^{18}O-CO_2 交换的控制机制。在生态系统同位素通量模拟中，计算 ^{18}O-H_2O 和 ^{18}O-CO_2 的空气动力学分馏系数时，考虑湍流扩散的作用是至关重要的。采用稳态假设并未改变同位素通量日峰值，但峰值出现时间提前了 1.5 小时。涡度相关观测到的能量平衡不闭合使得同位素通量模拟值变化不大，这是由于 SiLSMs 的各变量之间相反作用所致。总体来讲，SiLSM 对中午同位素通量的模拟比观测值低 63%。模拟误差有三个潜在原因，即 $\delta_{L,e}$ 模拟值偏高、同位素通量观测值的系统误差和 CO_2 水合作用的不确定性等，其中水合作用参数化是最为可能的原因。用同位素通量观测值对 θ_{eq} 进行最优化，得到的最优值为 0.33，表明野外生长条件下大豆叶片的水合效率很低。

参考文献

Allison, C. A., R. J. Francey, and H. A. J. Meijer (1995), Recommendations for the reporting of stable isotope measurements of carbon and oxygen in CO_2 gas, in *Reference and intercomparison materials for stable isotopes of light elements, IAEA-tecdoc-825*, edited, pp. 155-162, Int. At. Energy Agency, Vienna.

Allison, G. B., and F. W. Leaney (1982), Estimation of isotopic parameters, using constant-feed pans, *Journal of Hydrology*, *55*, 151-161.

Allison, G. B., and C. J. Barnes (1983), Estimation of evaporation from non-vegetated surfaces using natural deuterium, *Nature*, *301*, 143-145.

Anderson, L. J., H. Maherali, H. B. Johnson, H. W. Polley, and R. B. Jackson (2001), Gas exchange and photosynthetic acclimation over subambient to elevated CO_2 in a C_3-C_4 grassland, *Global Change Biology*, *7*, 693-707.

Aranibar, J. N., J. A. Berry, W. J. Riley, D. E. Pataki, B. E. Law, and J. R. Ehleringer (2006), Combining meteorology, eddy fluxes, isotope measurements, and modeling to understand environmental controls of carbon isotope discrimination at the canopy scale, *Global Change Biology*, *12*, 710-730,doi:710.1111/j.1365-2486.2006.01121.x.

Baertschi, P. (1976), Absolute ^{18}O content of standard mean ocean water, *Earth and Planetary Science Letters*, *31*, 314-344.

Baker, J. M. (2000), Conditional sampling revisited, *Agricultural and Forest Meteorology*, *104*(1), 59-65, doi:10.1016/S0168-1923(1000)00147-00147.

Baker, J. M., and T. J. Griffis (2005), Examining strategies to improve the carbon balance of corn/soybean agriculture using eddy covariance and mass balance techniques, *Agricultural and Forest Meteorology*, *128*, 163-177.

Baldocchi, D. (1994), A comparative study of mass and energy exchange over a closed C3 (wheat) and an open C4 (corn) canopy: I. The partitoning of available energy into latent and sensible heat exchange, *Agricultural and Forest Meteorology*, *67*, 191-220.

Baldocchi, D. D., and D. R. Bowling (2003), Modelling the discrimination of $^{13}CO_2$ above and within a temperate broad-leaved forest canopy on hourly to seasonal time scales, *Plant, Cell and Environment*, *26*, 231-244.

Barbour, M. M., and G. D. Farquhar (2000), Relative humidity- and ABA-induced

variation in carbon and oxygen isotope ratios of cotton leaves, *Plant, Cell and Environment*, *23*, 473-485.

Barbour, M. M., U. Schurr, B. K. Henry, C. Wong, and G. D. Farquhar (2000), Variation in the oxygen isotope ratio of phloem sap sucrose from Castor Bean. Evidence in support of the Peclet Effect, *Plant Physiology*, *123*, 671-679.

Barbour, M. M., J. S. Roden, G. D. Farquhar, and J. R. Ehleringer (2004), Expressing leaf water and cellulose oxygen isotope ratios as enrichment above source water reveals evidence of a Peclet effect, *Oecologia*, *138*, 426-435.

Bariac, T., J. Gonzalez-Dunia, F. Tardieu, D. Tessier, and A. Mariotti (1994), Spatial variation of the isotopic composition of water (^{18}O, ^{2}H) in organs of aerophytic plants: 1. Assemssment under laboratory conditions, *Chemical Geology*, *115*, 307-315.

Barnes, C. J., and G. B. Allison (1988), Tracing of water movement in the unsaturated zone using stable isotopes of hydrogen and oxygen, *Journal of Hydrology*, *100*, 143-176.

Bavin, K. T. (2008), Impacts of land management on the greenhouse gas budget of two alternatively managed ecosystems, 123 pp, University of Minnesota, Twin Cities.

Beljaars, A. C. M., and A. A. M. Holtslag (1991), Flux parameterization over land surfaces for atmospheric models, *Journal of Applied Meteorology*, *30*, 327-341.

Bender, M., T. Sowers, and L. Labeyrie (1994), The Dole effect and its variations during the last 130,000 years as measured in the Vostok ice core, *Global Biogeochemical Cycles*, *8*(3), 363-376.

Bowling, D. R., D. Baldocchi, and R. K. Monson (1999), Dynamics of isotopic exchange of carbon dioxide in a Tennessee deciduous forest, *Global Biogeochemical Cycles*, *13*(4), 903-922,doi:910.1029/1999GB900072.

Bowling, D. R., P. P. Tans, and R. K. Monson (2001), Prtitioning net ecosystem carbon exchange with isotopic fluxes of CO2, *Global Change Biology*, *7*, 127-145.

Bowling, D. R., D. E. Pataki, and J. R. Ehleringer (2003a), Critical evaluation of micrometeorological methods for measuring ecosystem-atmosphere isotopic exchange of CO2, *Agricultural and Forest Meteorology*, *116*, 159-179.

Bowling, D. R., S. D. Sargent, B. D. Tanner, and J. R. Ehleringer (2003b), Tunable diode laser absorption spectroscopy for stable isotope studies of ecosystem-atmosphere CO_2

exchange, *Agricultural and Forest Meteorology*, *118*(1-2), 109,doi:110.1016/S0168-1923 (1003)00074-00071.

Brenninkmeier, C., K. Kraft, and M. Mook (1983), Oxygen isotope fractionation between CO_2 and H_2O, *Isot. Geosci*, *1*, 181-190.

Brunel, J. P., H. J. Simpson, A. L. Herczeg, R. Whitehead, and G. R. Walker (1992), Stable isotope composition of water vapor as an indicator of transpiration fluxes from rice crops, *Water Resources Research*, *28*(5), 1407-1416.

Campbell, G. S. (1977), *An introduction to Environmental Biophysics*, Spring-Verlag, Berlin.

Cappa, C. D. (2003), Isotopic fractionation of water during evaporation, *Journal of Geophysical Research*, *108*(D16), 4525-4534.

Cernusak, L. A., J. S. Pate, and G. D. Farquhar (2002), Diurnal variation in the stable isotope composition of water and dry matter in fruiting *Lupinus angustifolius* under field conditions, *Plant, Cell and Environment*, *25*, 893-907.

Cernusak, L. A., C. S. Wong, and G. D. Farquhar (2003), Oxygen isotope composition of phloem sap in relation to leaf water in *Ricinus communis*, *Functional Plant Biology*, *30*, 1059-1070.

Cernusak, L. A., G. D. Farquhar, and J. S. Pate (2005), Environmental and physiological controls over oxygen and carbon isotope composition of Tasmanian blue gum, *Eucalyptus globulus*, *Tree Physiology*, *25*, 129-146.

Ciais, P., et al. (1997a), A three-dimensional synthesis study of delta O-18 in atmospheric CO2, 2, Simulation with the TM2 transport model, *Journal of Geophysical Research*, *102*(5873-5883).

Ciais, P., et al. (1997b), A three-dimensional synthesis study of $\delta^{18}O$ in atmospheric CO_2. 1. surface fluxes, *Journal of Geophysical Research*, *102*(D5), 5857-5872.

Collatz, G. J., J. T. Ball, C. Grivet, and J. A. Berry (1991), Physiological and environmental regulation of stomatal conductance, photosynthesis and transpiration: a model that includes a laminar boundary layer, *Agricultural and Forest Meteorology*, *54*, 107-136.

Collatz, G. J., M. Ribas-Carbo, and J. A. Berry (1992), Coupled photosynthesis-stomatal conductance model for leaves of C_4 plants, *Australian Journal of Plant Physiology*, *19*,

519-538.

Cousins, A. B., M. R. Badger, and S. v. Caemmerer (2006), A transgenic approach to understanding the influence of carbonic anhydrase on $C^{18}OO$ discrimination during C_4 photosynthesis, *Plant Physiology*, *142*, 662-672.

Cousins, A. B., M. R. Badger, and S. von Caemmerer (2008), C4 photosynthetic isotope exchange in NAD-ME- and NADP-ME-type grasses, *Journal of Experimental Botany*, *59*(7), 1695-1703.

Craig, H., and L. I. Gordon (1965), Deuterium and oxygen 18 variations in the ocean and the marine atmosphere, paper presented at Proc. Conf. Stable Isotopes in Oceanographic Studies and Paleotemperatures, Laboratory of Geology and Nuclear Sciences, Pisa.

Cullen, L. E., M. A. Adams, M. J. Anderson, and P. F. Grierson (2008), Analyses of $\delta^{13}C$ and $\delta^{18}O$ in tree rings of *Callitris columellaris* provide evidence of a change in stomatal control of photosynthesis in response to regional changes in climate, *Tree Physiology*, *28*, 1525-1533.

Cuntz, M., P. Ciais, G. Hoffmann, and W. Knorr (2003a), A comprehensive global three-dimensional model of $\delta^{18}O$ in atmospheric CO_2: 1. Validation of surface processes, *Journal of Geophysical Research*, *108*(D17), 4527,doi:4510.1029/2002JD003153.

Cuntz, M., P. Ciasis, G. Hoffmann, C. E. Allison, R. J. Francey, W. Knorr, P. P. Tans, J. W. C. White, and I. Levin (2003b), A comprehensive global three-dimensional model of $\delta^{18}O$ in atmospheric CO_2: 2. Mapping the atmospheric signal, *Journal of Geophysical Research*, *108*(D17), 4528, doi:4510.1029/2002JD003154.

Cuntz, M., J. Ogee, G. D. Farquhar, P. Peylin, and L. A. Cernusak (2007), Modelling advection and diffusion of water isotopologues in leaves, *Plant, Cell and Environment*, *30*, 892-909.

Dawson, T. E., S. Mambelli, A. H. Plamboech, P. H. Templer, and K. P. Tu (2002), Stable isotopes in plant ecology, *Annu. Rev. Ecol. Syst.*, *33*, 507-559.

Dongmann, G., H. W. Nurnberg, H. Forstel, and K. Wagener (1974), On the enrichment of $H_2{}^{18}O$ in the leaves of transpiring plants, *Rad. and Environm. Biophys*, *11*, 41-52.

Drake, B. G., M. A. Gonzalez-Meler, and S. P. Long (1997), More efficient plants: A

consequence of rising atmospheric CO_2?, *Annual Review of Plant Physiology and Plant Molecular Biology*, *48*, 609-639.

Epstein, S., and C. Yapp (1977), Isotope tree thermometers, *Nature*, *266*, 477-478.

Farquhar, G. D., K. T. Hubick, A. G. Condon, and R. A. Richard (1989), Carbon isotope discrimination and water use efficiency, in *Stable Isotopes in Ecological Research*, edited by P. W. Rundel et al., pp. 21-46, Springer-Verlag, New York.

Farquhar, G. D., and J. Lloyd (1993), Carbon and oxygen isotope effects in the exchange of carbon dioxide between terrestrial plants and the atmosphere, in *Stable Isotopes and Plant Carbon-Water Relations*, edited by J. R. Ehleringer et al., pp. 47-70, Academic Press, San Diego.

Farquhar, G. D., J. Lloyd, J. A. Taylor, L. B. Flanagan, J. P. Syvertsen, K. T. Hubick, S. C. Wong, and J. R. Ehleringer (1993), Vegetation effects on the isotope composition of oxygen in atmospheric CO_2, *Nature*, *363*, 439-443.

Farquhar, G. D., and K. S. Gan (2003), On the progressive enrichment of the oxygen isotopic composition of water along a leaf, *Plant, Cell and Environment*, *26*, 801-819.

Farquhar, G. D., and L. A. Cernusak (2005), On the isotopic composition of leaf water in the non-steady state, *Functonal plant biology*, *32*, 293-303.

Farquhar, G. D., L. A. Cernusak, and B. Barnes (2007), Heavy water fractionation during transpiration, *Plant Physiology*, *143*, 11-18.

Farris, F., and B. R. Strain (1978), The effects of water-stress on leaf $H_2{}^{18}O$ enrichment, *Radiation and Environmental Biophysics*, *15*, 167-202.

Flanagan, L. B., J. P. Comstock, and J. R. Ehleringer (1991), Comparison of modeled and observed environmental influences on the stable oxygen and hydrogen isotope composition of leaf water in *Phaseolus vulgaris* L., *Plant Physiology*, *96*, 588-596.

Flanagan, L. B., S. L. Phillips, J. R. Ehleringer, J. Lloyd, and G. D. Farquhar (1994), Effect of changes in leaf water oxygen isotopic composition on discrimination against (Coo)-O-18-O16 during photosynthetic gas exchange, *Aust. J. Plant Physiol.*, *21*, 221-234.

Flanagan, L. B., and G. T. Varney (1995), Influence of vegetation and soil CO_2 exchange on the concentration and stable oxygen isotope ratio of atmospheric CO_2 within a

Pinus Resinosa Canopy, *Oecologia*, *101*, 37-44.

Flanagan, L. B., J. R. Brooks, and V. G. T (1997), Discrimination against (COO)-O-18-O-16 during photosynthesis and the oxygen isotope ratio of respired CO_2 in boreal forest ecosystems, *Global Biogeochemical Cycles*, *11*, 83-98.

Forstel, H. (1978), The enrichment of 18O in leaf water under natural conditions, *Radiat Environ Biophys*, *15*, 323-344.

Francey, R. J., and P. P. Tans (1987), Latitudinal variation in oxygen-18 of atmospheric CO_2, *Nature*, *327*, 495-497.

Friedli, H., U. Siegenthaler, and D. Rauber (1987), Measurements of concentration, $^{13}C/^{12}C$ and $^{18}O/^{16}O$ ratios of tropospheric carbon dioxide over Switzerland, *Tellus Series B-Chemical and Physical Meteorology*, *39*, 80-88.

Gan, K. S., S. C. Wong, J. W. H. Yong, and G. D. Farquhar (2002), ^{18}O spatial patterns of vein xylem water, leaf water, and dry matter in cotton leaves, *Plant Physiology*, *130*, 1008-1021.

Garratt, J. (1992), *The Atmospheric Boundary layer*, Cambridge University Press.

Gat, J. R., and C. Bowser (1991), The heavy isotope enrichment of dwater in coupled evaporative systems, in *Stable Isotope Geochemistry: A Tribute to Samuel Epstein*, edited by H. P. J. Taylor et al., pp. 159-168, The Feochemical Society, St. Louis, MO, USA.

Gat, J. R. (1996), Oxygen and hydrogen isotopes in the hydrologic cycle, *Annu Rev. Earth Planet. Sci.*, *24*, 225-262.

Gat, J. R., B. Klein, Y. Kushnir, W. Roether, H. Wernli, R. Yam, and A. Shemesh (2003), Isotope composition of air moisture over the Mediterranean Sea: an index of the air-sea interaction pattern, *Tellus*, *55B*, 953-965.

Gianfrani, L., G. Gagliardi, M. van Burgel, E. R. T. Kerstel, and E. R. T. Title (2003), Isotope analysis of water by means of near-infrared dual-wavelength diode laser spectroscopy, *Optics Express*, *11*, 1566-1576.

Gillon, J., and D. Yakir (2001), Influence of carbonic anhydrase activity in terrestrial vegetation on the ^{18}O content of atmospheric CO_2, *Science*, *291*, 2584-2587.

Gillon, J. S., and D. Yakir (2000a), Internal conductance to CO_2 diffusion and $C^{18}OO$

discrimination in C_3 leaves, *Plant Physiology*, *123*, 201-213.

Gillon, J. S., and D. Yakir (2000b), Naturally low carbonic anhydrase activity in C_4 and C_3 plants limits discrimination against $C^{18}OO$ during photosynthesis, *Plant, Cell and Environment*, *23*, 903-915.

Gray, J., and T. P (1976), Climatic information from $^{18}O/^{16}O$ ratios of cellulose in tree rings, *Nature*, *262*, 481-482.

Griffis, T. J., J. M. Baker, S. D. Sargent, B. D. Tanner, and J. Zhang (2004), Measuring field-scale isotopic CO_2 fluxes with tunable diode laser absorption spectroscopy and micrometeorological techniques, *Agricultural and Forest Meteorology*, *124*, 15-29.

Griffis, T. J., J. M. Baker, and J. Zhang (2005a), Seasonal dynamics and partitioning of isotopic CO_2 exchange in a C_3/C_4 managed ecosystem, *Agricultural and Forest Meteorology*, *132*, 1-19.

Griffis, T. J., X. Lee, J. M. Baker, S. D. Sargent, and J. Y. King (2005b), Feasibility of quantifying ecosystem-atmosphere $C^{18}O^{16}O$ exchange using laser spectroscopy and the flux-gradient method, *Agricultural and Forest Meteorology*, *135*, 44-60.

Griffis, T. J., J. Zhang, J. M. Baker, N. Kljun, and B. K (2007), Determining carbon isotope signatures from micrometeorological measurements: Implications for studying biosphere-atmosphere exchange processes, *Boundary-Layer Meteorology*, *123*, 295-316, doi:210.1007/s10546-10006-19143-10548.

Griffis, T. J., S. D. Sargent, J. M. Baker, X. Lee, B. D. Tanner, J. Greene, E. Swiatek, and K. Billmark (2008), Direct measurement of biosphere-atmosphere isotopic CO_2 exchange using the eddy covariance technique, *Journal of Geophysical Research*, *113*, D08304, doi:08310.01029/02007JD009297.

Harwood, K. G., J. S. Gillon, H. Griffiths, and M. S. J. Broadmeadow (1998), Diurnal variation of Δ^{13}CO2, $\Delta C^{18}O^{16}O$ and evaporative site enrichment of $\delta H_2{}^{18}O$ in *Piper aduncum* under field conditions in Trinidad, *Plant, Cell and Environment*, *21*, 269-283.

Harwood, K. G., J. S. Gillon, A. Roberts, and H. Griffiths (1999), Determinants of isotopic coupling of CO_2 and water vapour within a *Quercus petraea* forest canopy, *Oecologia*, *119*, 109-119.

He, H., and R. B. Smith (1999), Stable isotope composition of water vapor in the

atmospheric boundary layer above the forests of New England, *Journal of Geophysical Research*, *104*(D9), 11 656-611 673.

He, H., X. Lee, and R. B. Simth (2001), Deuterium in water vapor evaporated from a coastal salt marsh, *Journal of Geophysical Research*, *106*(D11), 12,183-112,191.

Helliker, B. R., and J. R. Ehleringer (2000), Establishing a grassland signature in veins: ^{18}O in the leaf water of C_3 and C_4 grasses, *PNAS*, *97*(14), 7894-7898.

Helliker, B. R. (2001), Oxygen Isotopes in C3 and C4 grasses, University of Utah, Salt Lake City, UT.

Helliker, B. R., and J. R. Ehleringer (2002a), Grass blades as tree rings: environmentally induced changes in the oxygen isotope ratio of cellulose along the length of grass baldes, *New Phytologist*, *155*, 417-424.

Helliker, B. R., and J. R. Ehleringer (2002b), Differential ^{18}O enrichment of leaf cellulose in C_3 *versus* C_4 grasses, *Functional Plant Biology*, *29*, 435-442.

Hesterburg, R., and U. Siegenthaler (1991), Production and stable isotopic composition of CO_2 in soil near Bern, Switzerland, *Tellus*, *43B*(197-205).

Hoefs, J. (2004), *Stable Isotope Geochemistry*, 244p. pp., Springer, Berlin.

Hoffmann, G., et al. (2004), A model of the Earth's Dole effect, *Global Biogeochemical Cycles*, *18*, GB1008, doi:1010.1029/2003GB002059.

Huang, J., X. Lee, and E. G. Patton (2009), Dissimilarity of scalar transport in the convective boundary layer in inhomogeneous landscapes, *Boundary-Layer Meteorology*, *130*, 327-345. DOI 310.1007/S10546-10009-19356-10548.

Jacob, H., and C. Sonntag (1991), An 8-year record of the seasonal variation of ^{2}H and ^{18}O in atmospheric water vapour and precipitation at Heidelberg, Germany, *Tellus*, *43B*, 291-300.

Jacobs, C. M. J. (1994), Direct impact of atmospheric CO_2 enrichment on regional transpiration. , 179 pp, Wageningen Agricultural University, Wageningen, Netherlands.

Kaimal, J. C., and J. J. Finnigan (1994), *Atmospheric Boundary Layer Flows: Their Structure and Measurement*, Oxford Univ. Press, New York.

Katul, G. G., P. L. Finkelstein, J. F. Clarke, and T. G. Ellestad (1996), An investigation of teh conditiona sampling method used to esitmate fluxes of active, reactive, and passive scalars, *Journal of Applied Meteorology*, *35*(10), 1835-1845.

Kerstel, E. R. T., R. van Trigt, N. Dam, J. Reuss, and H. A. J. Meijer (1999), Simultaneous determination of the 2H/1H, 17O/16O, and 18O/16O isotope abundance ratios in water by means of laser spectrometry, *Analytical Chemistry*, *71*, 5297-5303.

Kerstel, E. R. T., G. Gagliardi, L. Gianfrani, H. A. J. Meijer, R. van Trigt, and R. T. Ramaker (2002), Determination of the H^2/H^1,$O^{17}/O^{16,}$ and O^{18}/O^{16} isotope ratios in water by means of tunable diode laser spectroscopy at 1.39 μm, *Spectrochimca Acta*, *58A*, 2389-2396.

Leaney, F. W., C. B. Osmond, C. A. Allison, and H. Ziegler (1985), Hydrogen-isotope composition of leaf water in C_3 and C_4 plants: its relationship to the hydrogen-isotope composition of dry matter *Planta*, *164*, 215-220.

Lee, X. (2000), Air motion within and above forest vegetation in non-ideal conditions, *Forest Ecology and Management*, *135*, 3-18.

Lee, X., S. Sargent, R. Smith, and B. Tanner (2005), In situ measurement of the water vapor $^{18}O/^{16}O$ isotope ratio for atmospheric and ecological applications, *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, *22*, 555-565.

Lee, X., R. Smith, and J. Williams (2006), Water vapour $^{18}O/^{16}O$ isotope ratio in surface air in New England, USA, *Tellus*, *58B*, 293-304.

Lee, X., K. Kim, and R. Smith (2007), Temporal variations of the $^{18}O/^{16}O$ signal of the whole-canopy transpiration in a temperate forest, *Global Biogeochemical Cycles*, *21*, G3013.

Lee, X., T. J. Griffis, J. M. Baker, K. A. Billmark, K. Kim, and L. R. Welp (2009), Canopy-scale kinetic fractionation of atmospheric carbon dioxide and water vapor isotopes, *Global Biogeochemical Cycles*, *23*, GB1002, doi:1010.1029/2008GB003331.

Libby, L. M., L. J. Pandolfi, P. H. Payton, J. Marshall, III, B. Becker, and V. Giertz-Sienbenlist (1976), Isotopic tree thermometers, *Nature*, *261*, 284-288.

Long, S. P., E. A. Ainsworth, A. Rogers, and D. R. Ort (2004), Rising atmospheric carbon dioxide: palnt FACE the future, *Annu. Rev. Plant Physiol.*, *55*, 591-628,

doi:510.1146/annnurev.arplant.1155.031903.141610.

Maherali, H., C. D. Reid, H. W. Polley, H. B. Johnson, and R. B. Jackson (2002), Stomatal acclimation over a subambient to elevated CO_2 gradient in a C_3/C_4 grassland, *Plant, Cell and Environment*, *25*, 557-566.

Maherali, H., H. B. Johnson, and R. B. Jackson (2003), Stomatal sensitivity to vapour pressure difference over a subambient to elevated CO_2 gradient in a C_3/C_4 grassland, *Plant, Cell and Environment*, *26*, 1297-1306.

Majoube, M. (1971), Oxygen-18 and deuterium fractionation between water and steam. , *Journal De Chimie Physique Et De Physico-Chimie Biologique*, *68*, 1423-1436.

Mathieu, R., and T. Bariac (1996a), An isotopic study (^2H and ^{18}O) of water movements in clayey soils under a semi-arid climate, *Water Resources Research*, *32*, 779-789.

Mathieu, R., and T. Bariac (1996b), A numerical model for the simulation of stable isotope profiles in drying soils, *Journal of Geophysical Research*, *101*, 12585-12696.

McDowell, N., et al. (2008), Understanding the stable isotope composition of biosphere-atmosphere CO_2 exchange, *Eos*, *89*(10), 94-95.

Miller, J. B., D. Yakir, J. W. C. White, and P. P. Tans (1999), Measurement of O18/O16 in the soil-atmosphere CO2 flux, *Global Biogeochemical Cycles*, *13*(761-774).

Mills, G. A., and H. C. Urey (1940), The kinetics of isotopic exchange between carbon dioxide, bicarbonate ion, carbonate ion and water, *Journal of the American Chemical Society*, *62*, 1019-1026, doi:1010.1021/ja01862a01010.

Moreira, M. Z., L. D. S. L. Sternberg, L. A. Martinelli, R. L. Victoria, E. M. Barbosa, L. C. M. Bonates, and D. C. Nepstad (1997), Contribution of transpiration to forest ambient vapour based on isotopic measurements, *Global Change Biology*, *3*, 439-450.

Murphey, B. F., and A. O. Nier (1941), Variations in the relative abundance of the carbon isotopes, *Phys. Rev.*, *59*(9), 771-772, doi:710.1103/PhysRev.1159.1771.1102.

Nier, A. O. (1947), A mass spectrometer for isotope and gas analysis, *Rev. Sci. Instrum.*, *18*(6), 398-411, doi:310.1063/1061.1740961.

Ogee, J., P. Peylin, M. Cuntz, T. Bariac, Y. Brunet, P. Berbigier, P. Richard, and P. Ciais (2004), Partitioning net ecosystem carbon exchange into net assimilation and respiration with canopy-scale isotopic measurements: An error propagation analysis

with $^{13}CO_2$ and $CO^{18}O$ data, *Global Biogeochemical Cycles*, *18*, GB2019, doi:2010.1029/2003GB002166.

Ogee, J., M. cuniz, P. Peylin, and T. Bariac (2007), Non-steady-state, non-uniform transpiration rate and leaf anatomy effects on the progressive stable isotope enrichment of leaf water along monocot leaves, *Plant, Cell and Environment*, *30*, 367-387.

Peylin, P., P. Ciais, A. S. Denning, P. P. Tans, J. A. Berry, and J. W. C. White (1999), A 3-dimensional study of delta-18O in atmospheric CO_2: contrbution of different land ecosystems, *Tellus*, *51B*, 642-667.

Polley, H. W., W. A. Dugas, P. C. Mielnick, and H. B. Johnson (2007), C_3-C_4 composition and prior carbon dioxide treatment regulate the response of grassland carbon and water fluxes to carbon dioxide, *Functional Ecology*, *21*, 11-18.

Rasse, D. P., G. Peresta, and B. G. Drake (2005), Seventeen years of elevated CO_2 exposure in a Chesapeake Bay Wetland: sustained but contrasting responses of plant growth and CO_2 uptake, *Global Change Biology*, *11*, 369-377, doi: 310.1111/j.1365-2486.2005.00913.x.

Raupach, M. R. (1989), Stand overstorey processes, *Philos. Trans. R. Soc. Ser. B*, *324*(1223), 175-190,doi:110.1098/rstb.1989.0043.

Riley, W. J., C. J. Still, M. S. Torn, and J. A. Berry (2002), A mechanistic model of $H_2{}^{18}O$ and $C^{18}OO$ fluxes between ecosystems and the atmosphere: Model description and sensitivity analyses, *Global Biogeochemical Cycles*, *16*(4), 1095, doi:1010.1029/2002GB001878.

Riley, W. J., C. J. Still, B. R. Helliker, M. Ribascarbos, and J. A. Berry (2003), ^{18}O composition of CO_2 and H_2O ecosystem pools and fluxes in a tallgrass prairie: Simulations and comparisons to measurements, *Global Change Biology*, *9*, 1567-1581, doi: 1510.1046/j.1529-8817.2003.00680.x.

Roden, J. S., G. Lin, and J. R. Ehleringer (2000), A mechanistic model for interpretation of hydrogen and oxygen isotope ratios in tree-ring cellulose, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, *64*(1), 21-35.

Ronda, R. J., H. A. R. de Bruin, and A. A. M. Holtslag (2001), Representation of the canopy conductance in modeling the surface energy budget for low vegetation, *Journal of Applied Meteorology*, *40*, 1431-1444.

Sellers, P. J., et al. (1996), Comparison of radiative and physiological effects of doubled atmospheric CO_2 on climate, *Science*, *271*, 1402-1406.

Shuttleworth, W. J., and R. J. Gurney (1990), The theoretical relationship between foliage temperature and canopy resistance in sparse crops, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, *116*, 497-519.

Smith, R. B. (1992), Deuterium in north Atlantic storm tops, *Journal of the Atmospheric Sciences*, *49*(22), 2041-2057.

Stern, L. A., R. Amundson, and W. Baisden (2001), Influence of soils on oxygen isotope ratio of atmospheric CO_2, *Global Biogeochemical Cycles*, *15*, 753-759.

Tans, P. P. (1980), On calculating the transfer of ^{13}C in reservoir models of the carbon cycle, *Tellus*, *32*, 464-469.

Tans, P. P. (1998), Oxygen isotopic equilibrium between carbon dioxide and water in soils, *Tellus,Ser. B*, *50*, 163-178.

Walker, C. D., and J. P. Brunel (1990), Examining evapotranspiration in a semi-arid region using stable isotopes of hydrogen and oxygen, *Journal of Hydrology*, *118*, 55-75.

Wang, X.-F., and D. Yakir (1995), Temporal and spatial variations in the oxygen-18 content of leaf water in different plant species, *Plant, Cell and Environment*, *18*, 1377-1385.

Wang, X.-F., and D. Yakir (2000), Using stable isotopes of water in evapotranspiration studies, *Hydrological Processes*, *14*, 1407-1421.

Wang, Y. P. (2000), A refinement to the two-leaf model for calculating canopy photosynthesis, *Agricultural and Forest Meteorology*, *101*, 143-150.

Webster, C. R., and A. J. Heymsfield (2003), Water isotope ratios D/H, $^{18}O/^{16}O$, $^{17}O/^{16}O$ in and out of clouds map dehydration pathways, *Science*, *302*, 1742-1745.

Welp, L. R., X. Lee, K. Kim, T. J. Griffis, K. Billmark, and J. M. Baker (2008), $\delta^{18}O$ of water vapor, evapotranspiration and the sites of leaf water evaporation in a soybean canopy, *Plant, Cell and Environment*, *31*, 1214-1228, doi: 1210.1111/j.1365-3040.2008.01826.x.

Wen, X., X. Sun, S. Zhang, G. Yu, S. D. Sargent, and X. Lee (2008), Continuous measurement of water vapor D/H and 18O/16O isotope ratios in the atmosphere, *Journal of Hydrology*, *349*, 489-500.

White, J. W. C., and S. D. Gedzelman (1984), The isotope composition of atmospheric water vapor and the concurrent meteorological conditions, *Journal of Geophysical Research*, *89*, 4937-4939.

Williams, T. G., L. B. Flanagan, and J. R. Coleman (1996), Photosynthetic gas exchange and discrimination against (CO2)-C-13 and (COO)-O-18-O-16 in tobacco plants modified by an antisense construct to have low chloroplastic carbonic anhydrase, *Plant Physiology*, *112*, 319-326.

Willmott, C. J. (1981), On the validation of models, *Physical Geography*, *2*, 184-194.

Wilson, K., et al. (2002), Energy balance closure at FLUXNET sites, *Agricultural and Forest Meteorology*, *113*, 223-243.

Yakir, D., J. A. Berry, and C. B. Osmond (1994), Isotopic heterogeneity of water in transpiring leaves: identification of the component that controls the delta-18O of atmospheric O_2 and CO_2, *Plant, Cell and Environment*, *17*, 73-80.

Yakir, D., and X.-F. Wang (1996), Fluxes of CO_2 and water between terrestrial vegetation and the atmosphere estimated from isotope measurements, *Nature*, *380*, 515-517.

Yakir, D. (1998), Oxygen-18 of leaf water: a crossroad for plant-associated isotopic signals, in *Stable isotopes and the integration of biological, ecological and geochemical processes*, edited by H. Griffiths, pp. 147-168, Bios, Oxford.

Yakir, D., and L. d. S. L. Sternberg (2000), The use of stable isotopes to study ecosystem gas exchange, *Oecologia*, *123*, 297-311.

Yamanaka, T., and T. Yonetani (1999), Dynamics of the evaporation zone in dry sandy soils, *Journal of Hydrology*, *217*, 135-148.

Zimmermann, U., K. O. Munnich, W. Roether, W. Kreutz, K. Schubach, and O. Siegel (1966), Tracers determine movement of soil moisture and evapotranspiration, *Science*, *152*, 346-347.

Zimmermann, U., D. Ehhalt, and K. O. Munnich (1967), Soil-water movement and evaporation: change in isotopic composition of the water, paper presented at Proceedings of the symposium on isotopes in hydrology, IAEA, Vienna.

附录 1　SiLSM 模型符号表

符号	定义
上标c	冠层
上标w	水汽
α	大豆冠层反射率，= 0.22
α_0	初始光能利用率，= 0.017 mg J^{-1}
α_{eq}	液态水与水汽之间的氧同位素平衡分馏系数，无量纲
α_k^w	水汽从叶片胞间空隙向大气扩散时的氧同位素分馏效应，无量纲
$\beta(\theta)$	土壤湿度函数，无量纲
Γ	CO_2 补偿点，mg m^{-3}
$\Gamma\,(T_{sk} = 298)$	298 K 温度下的 CO_2 补偿点，= 68.5ρ_a mg m^{-3}
δ	同位素比，‰
δ_a^c	参考高度z_m处大气的$\delta^{18}O$-CO_2，‰
δ_E	蒸腾或蒸发的$\delta^{18}O$-H_2O值，‰
$\delta_{L,b}$	叶片体积水^{18}O-H_2O的δ值，‰
$\delta_{L,bs}$	$\delta_{L,b}$ 的稳态值，‰
$\delta_{L,e}$	叶片蒸发点的$\delta^{18}O$-H_2O值，‰
$\delta_{L,es}$	$\delta_{L,e}$ 的稳态值，‰
$\delta_{L,e}^c$	叶片蒸发点上与水平衡作用后^{18}O- CO_2的δ值，‰
δ_s	土壤水的 $\delta^{18}O$-H_2O 值，‰
δ_s^c	土壤中空气的的$\delta^{18}O$- CO_2值，‰
δ_v	参考高度z_m处大气的$\delta^{18}O$-H_2O值，‰
δ_x	茎杆水的 $\delta^{18}O$-H_2O 值，‰
ε	地表辐射率，= 0.97
ε_{eq}^c	气态CO_2与液态水之间的平衡分馏系数，‰
ε_{eq}^w	气态水和液态水之间的平衡分馏系数，‰
ε_k^c	^{18}O-CO_2的冠层动力学分馏系数，‰
$\varepsilon_{k,s}^c$	^{18}O-CO_2 的土壤动力学分馏系数，‰

符号	定义
ε_k^w	^{18}O-H_2O 的冠层动力学分馏系数，‰
θ	5cm 土壤的体积含水量，VWC
θ_{eq}	叶片中 CO_2 水合程度系数，= 0.75
λ	蒸发潜热，= 2.45×10^6 J kg^{-1}
Φ_h	热量Monin-Obukohv相似函数从地表到参考高度的积分，无量纲
$\Phi_{h,c}$	热量Monin-Obukohv相似函数从地表到冠层高度的积分，无量纲
Φ_m	动量Monin-Obukohv相似函数从地表到参考高度的积分，无量纲
ρ_a	海平面空气密度，= 1.23 kg m^3
σ	Stefan-Boltzmann 常数，= 5.67×10^{-8} W m^{-2} K^{-4}
$\overline{w'\delta'}$	生态系统^{18}O-CO_2动力学同位素驱动力，‰ m s^{-1}
$\left(\overline{w'\delta'}\right)_c^{18}$	生态系统^{18}O-CO_2同位素驱动力的冠层组分，‰ m s^{-1}
$\left(\overline{w'\delta'}\right)_s^{18}$	生态系统^{18}O-CO_2同位素驱动力的土壤组分，‰ m s^{-1}
$C_a(\overline{w'\delta'})$	生态系统^{18}O-CO_2同位素通量，μmol m^{-2} s^{-1} ‰
a	风速衰减系数，无量纲
a_1	g_c^c 公式中经验系数，= 16.2
A_m	初级生产力，mg $m^{-2}s^{-1}$
$A_{m,max}$	强光和高 CO_2 浓度下的最大初级生产力，mg $m^{-2}s^{-1}$
$A_{m,max}(T_{sk}=298)$	温度为 298K、强光和高 CO_2 浓度下最大初级生产力，= 2.2 mg $m^{-2}s^{-1}$
A_n	作物 CO_2 净通量，mg $m^{-2}s^{-1}$
A_g	总同化率，mg $m^{-2}s^{-1}$
A_g^*	未受水分胁迫的总同化速率，mg $m^{-2}s^{-1}$
b	边界层阻力系数，= 283 $s^{0.5}$ m^{-1}
b_1	土壤湿度胁迫公式中的经验系数，= -5.8 ($\theta\leq0.21$)，-1.5 ($\theta>0.21$)
b_2	土壤湿度胁迫公式中的经验系数，= -24.9 ($\theta\leq0.21$)，0.5 ($\theta>0.21$)
B	界面底层 Dalton 数，无量纲
c_p	等压比热，= 1004 J K^{-1} kg^{-1}
c_w	液态水的比热，= 4218 J K^{-1} kg^{-1}

符号	定义
C	水的摩尔密度，= 55.5×10^3 mol m^{-3}
C_i	胞间CO_2摩尔浓度，μmol m^{-3}
C_a	参考高度z_m处的CO_2摩尔浓度，μmol m^{-3}
C_s	土壤空气的CO_2摩尔浓度，μmol m^{-3}
C_H	动量传导系数，无量纲
d	零平面位移，m
D	^{18}O-H_2O 在水中的扩散率，m^2 s^{-1}
D_0	水汽压亏缺常数，= 0.44 kPa
D_s	参考高度 z_m 上的饱和水汽密度差，g m^{-3}
E	蒸腾速率，mol m^{-2} s^{-1}
$f(\theta)$	$\beta(\theta)$ 的函数，无量纲
F_c	冠层CO_2通量，μmol m^{-2} s^{-1}
F_N	生态系统净CO_2交换，μmol m^{-2} s^{-1}
F_s	土壤CO_2通量，μmol m^{-2} s^{-1}
FC	田间持水量，= 0.36 VWC
g_a	空气动力学导度，mol m^{-2} s^{-1}
g_c^c	冠层对 CO_2 的导度，mol m^{-2} s^{-1}
g_m	叶肉导度，mol m^{-2} s^{-1}
$g_m(T_{sk}=298)$	温度为 298K 下的叶肉导度，= 7.0 mm s^{-1}
g_{min}^w	最小气孔导度，mol m^{-2} s^{-1}
g_{min}^c	CO_2 的角质层导度，= 0.25 mm s^{-1}
G	土壤热通量密度，W m^{-2}
h	冠层高度，m
H	感热通量密度，W m^{-2}
k	von Karman常数，= 0.4
K_x	消光系数，= 0.6
KH	冠层顶的涡度扩散系数，s m^{-1}

符号	定义
l_w	叶宽，= 0.05 m
L	Monin-Obukhov长度，无量纲
L_{eff}	叶片中液态水扩散的有效距离，= 1.0638×10^{-11} m
LAI	叶面积指数，无量纲
LWC	叶片尺度叶片水含量（单位面积叶片含水克数），g m^{-2}
P	Peclet数，无量纲
P_a	海平面大气压，= 99 kPa
PAR	光合有效辐射，W m^{-2}
$q^*(T_{sk})$	冠层表面的饱和比湿，无量纲
q_a	参考高度上的比湿，无量纲
Q_{10} (g_m)	Q_{10} 值，= 2.0
Q_{10} (A_m)	Q_{10} 值，= 2.0
r_a	冠层顶以上的空气动力学阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
$r_{a,c}$	冠层内空气层的空气动力学阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
r_b^c	CO_2的边界层阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
r_c^c	冠层对CO_2的阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
r_s^c	土壤对CO_2的阻力，，= 800 s m^{-1}
r_b^w	边界层对H_2O的阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
r_c^w	冠层对H_2O的阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
r_t	参考高度z_m对水汽和热量的总阻力，s m^{-1}或m^2 s mol^{-1}
R_d	暗呼吸速率，mg m^{-2} s^{-1}
R_L	天空长波辐射通量密度，W m^{-2}
R_S	太阳短波辐射通量密度，W m^{-2}
R_{VPDB}	VPDB 标准下 ^{18}O-CO_2 的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比，= 2.088349077×10^{-3}
R_{VSMOW}	VSMOW 标准下 ^{18}O-H_2O 的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比，= 2.0052×10^{-3}
RH	参考高度上空气的相对湿度，%
RH_i	外界空气相对于冠层温度的相对湿度，%

符号	定义
R_d	暗呼吸速率，mg $m^{-2}s^{-1}$
R_{es}	叶片蒸发点水的 $^{18}O/^{16}O$ 比，无量纲
R_v	环境空气水汽的$^{18}O/^{16}O$摩尔比，无量纲
R_x	木质部水的$^{18}O/^{16}O$摩尔比，无量纲
t	时间，hr
$T_1(A_m)$	温度阈值低值，= 281 K
$T_1(g_m)$	温度阈值低值，= 278 K
$T_2(A_m)$	温度阈值高值，= 311 K
$T_2(g_m)$	温度阈值高值，= 301 K
T_a	参考高度上气温，K
T_s	土壤温度，K
T_{sk}	冠层表面温度，K
u^*	摩擦速度，m s^{-1}
u_c	冠层内平均风速，m s^{-1}
u_h	冠层顶风速，m s^{-1}
u_m	参考高度上风速，m s^{-1}
w	垂直风速，m s^{-1}
w_i	胞间空气的（轻）水汽摩尔分数，mol mol^{-1}
W	冠层尺度叶片含水量（单位土地面积上叶片含水克数），g m^{-2}
WP	凋萎系数，= 0.15 VWC
z_m	参考高度，= 3 m
z_o	动量的表面粗糙度，m
z_{oT}	温度的表面粗糙度，m

附录 2　同位素观测方法

A2.1 TGA 简介

TGA100A 痕量气体分析仪(Campbell Scientific, Inc., Logan, Utah)采用可调谐二极管激光吸收光谱学(TDLAS)，通过对比样品气体和参考气体(已知同位素含量)的红外吸收光谱来测量空气样品中痕量气体含量。该技术敏感性高，速度快，选择性多。TGA100A 是为野外使用设计的坚固的可移动仪器。一般用作二氧化碳和水中同位素、甲烷或一氧化二氮的梯度通量或涡度相关通量观测，TGA100A 的浓度观测数据可以记录在 Campbell Scientific 数据采集器上，以模拟电压的形式输出，或存储于电脑硬盘设备。

图 A1 痕量气体分析仪(TGA100A, Campbell Scientific, Inc., Logan, Utah)

Figure A1　Trace Gas Analyser (TGA100A, Campbell Scientific, Inc., Logan, Utah)

(1) 用小气候方法测量痕量气体通量

TGA100A 非常适合于用小气候技术测量痕量气体通量。它设计坚固，能最大程度上隔离环境的影响，在野外条件下能可靠工作，除此之外，它还能与一些硬件和软件兼容，使得测量更方便。为了用涡度相关(EC)方法测量痕量气体通量，TGA100A 的采样速率、响应频率、敏感性和可选择性都进行了优化。增加一个 CSI 数据采集器

和一贯 CSAT3 声波风速计后，便成为完整的 EC 系统。TGA100A 也支持用梯度方法测量痕量气体通量。可以用计算机或数据采集器控制切换阀，计算单一采样点或多采样点的平均浓度。

(2) 可测痕量气体种类

通过选择合适的激光器、探测器和参考气体，TGA100A 可以测量吸收谱线在 3 至 10 微米之间的气体。铅盐可调谐二极管激光器的调谐范围很小，一般一个连续调谐模式内为吸收谱线差异为 1 至 3 cm^{-1}。某些情况下，同一激光器可以测量多种气体，但是通常每种气体都需要单独的激光器。激光室中有两个激光座(另有一个可选激光座，共 4 个激光位)，最多可以测量 4 种不同品种，不同品种转换只需要转动激光室，安装相应电线，进行简单的光学调整，切换参考气体。

通过在两个或三个吸收谱线之间交替光谱扫描，TGA100A 就可以同时测量两种或三种气体。这需要各个吸收谱线很接近(差异约为 1 cm^{-1})，所以这只有在特别情况下才能进行。在测量二氧化碳中 $\delta^{13}C$ 和 $\delta^{18}O$ 同位素比，或者水汽中 $\delta^{18}O$ 和 δ D 同位素比的测量中，可以采用这种复合扫描模式，每个扫描切换到不同的同位素。

另外有一些气体也可以采用复合扫描模式，如一氧化碳和氧化亚氮，氧化亚氮和甲烷，但是测量噪声会比只测量一种气体大。只测量一种气体，可以选择该气体最强吸收谱线的波长。而同时测量两种气体就需要折衷，为了在激光器较小的调谐范围内找到每种气体的吸收谱线，势必导致所选吸收谱线不是最强的。

(3) 运行环境

TGA 坚固的外壳，简单、坚固的光学设计使其能维持对准状态，可靠地在野外运行。光学和电子部件安装在绝缘的玻璃纤维罩中，能对光具座减震，减小温度变化。如果在开放环境中运行 TGA100A，建议使用 TGA100A 绝缘罩和 TGA100A 温度控制器。

分析仪的样品管和参考管在低气压状态下工作(通常低于 75hPa)，通过降低吸收谱线的宽度来最大限度的降低干扰气体的吸收。因为体积流率与气压成反比，所以低的工作气压也会加快样品室里空气的周转，进而降低仪器的时间常数。TDL 的扫描速率室 500 Hz，分析中光谱平均为 10 Hz。分析仪达到 ppbv 水平精度，对如氧化亚氮、甲烷和氨等典型微量气体的反应频率为 3 Hz。

(4) 激光器冷却方法

TGA100A 的光源是铅盐激光器，运行温度在 80 到 140K 之间。有两种方法安装和冷却激光器：TGA100A 液氮激光室和 TGA100A 制冷器激光系统。

TGA100A 液氮激光室位于仪器罩内，能容纳 10.4 升液态氮，有一个激光架，可放置两个激光器。另外有一个备用激光架，也可以再安装两个激光器。液氮激光室保温时间取决于激光器运行时间，以及激光架和液氮罐之间的导热率。导热率取决于激光器工作温度，这在生产时设置，以便提供至少 5 天的运行保温时间。

TGA100A 制冷器激光系统采用闭路式循环致冷系统冷却激光器，而不使用液氮。该系统包括一个真空泵室(分析仪壳内)，一个压缩机(壳外)和 3.1 米长气体传输软管(也可以更长)。TGA100A 分析仪致冷系统可以连续工作，只需要定期抽空，以便维持真空泵绝缘。与 TGA100A 液氮激光室相似，TGA100A 制冷机激光系统同样可以安装一个或两个激光器，也可以扩展一个激光架，安装最多四个激光器。压缩机需要遮光，维持 10 到 35°C，气体传输管维持在 5°C 以上。TGA100A 制冷机激光系统的外壳长度比 TGA100A 的长 2.5cm。

A2.2 冠层 ^{18}O-H_2O 的观测

(1) 仪器设计

在我们的系统中，选用铅盐二极管激光器(Specdilas IR-1500.8, Laser Components, GmbH, Olching, Germany)，$H_2{}^{16}O$ 和 $H_2{}^{18}O$ 的吸收谱线分别选为 1500.546 和 1501.188 cm^{-1}，方法同 Bowling 等(2003)。这些吸收谱线的选择基于以下标准：1) 对 $H_2{}^{18}O$ 谱线的强吸收；2) $H_2{}^{18}O$ 的吸收谱线与 $H_2{}^{16}O$ 吸收谱线接近，这样能提供与自然同位素丰度相当的吸光度，避免了谱线饱和的风险；3) 空气中无其他微量气体的明显干扰；4) 吸收谱线附近有合适的 HDO 吸收谱线(1501.116 cm^{-1})，这样无需硬件调整，系统即可切换到 HDO/$H_2{}^{16}O$ 模式。激光由液氮冷却，温度控制在 91.2K。选择 1501 cm^{-1}(6.66 μm)附近的吸收谱线，就需要选择性液氮制冷的碲镉汞(MCT)晶体探测器，它比标准的热电冷却 MCT 探测器的反应波长更长，达到 5 μm。

能符合上述标准的吸收谱线的基态能量差相对较大，所以吸光度随温度的变化明显。为了将温度的影响降到最低，我们将分析仪放在一个绝缘的外壳内，精确控制温度，周期性向样品室注入校准样品来校准系统，为了确保空气样品和校准样品在同一温度，在样品进入吸收室前，先流经外壳内足够长的管子距离。通过这种方法，容易校正环境温度的日变化引起的仪器的变化。CO_2 同位素测量系统的试验表明该分析仪在大田中的性能与实验室中相同。*McManus* 等(2002)用每种同位素的强谱线和更短的主要同位素(CO_2)路径长，来使基态能量与吸收相匹配，但结果不如 *Bowling* 等(2003)采用的简单方法和本文中的结果好。

分析仪为定向吸收光谱仪，样气室中的工作气压比典型值 12 hPa 更低，以便进一步降低吸收谱线的压力至宽，加快样品切换率。参考气体由仪器罩内密闭瓶中的液态水提供(图 A2)。用一个控制流速的针阀从瓶子顶部抽取纯水汽。低气压可以确保

始终有水汽流过参考气室，即使仪器罩打开，参考气瓶冷却到室温。加盖仪器罩时，内部的加热器将温度控制在 40°C，参考水流速大约 0.35 克/天。这样就在参考水中加入了 $H_2{}^{18}O$，其浓度达到自然丰度的 4 倍左右，与两个波数的参考吸收值相当($H_2{}^{16}O$ 为 10%，$H_2{}^{18}O$ 为 13%)。

样品管长 153.08cm，容积为 400mL。参考管长 4.35cm，容积 10mL。在分析仪外壳上安装了一个四通进气管，其中一个进气管与样品管相连。未选用的进气管回流到真空泵以维持流量，减小气压瞬变。每个样品管的流量由一个临界小孔控制(长度为 0.0178cm)，流速为 0.25 升/分钟(STP，标准温度和气压)。分气管备安装在仪器罩内，这是为了保持温暖，减少分气管与样品管之间的管子长度，并减少转换输入后的校正时间。典型的切换方案是在每个进气口取样 20 秒，顺序为零气、标气、零气和环境空气。一个测量循环中使用零气两次，以补偿还原时间误差——由对两种同位素之间变换的响应速度的微小差异引起的误差。在以下的计算中将每次切换后 3 到 7 秒内的数据忽略。

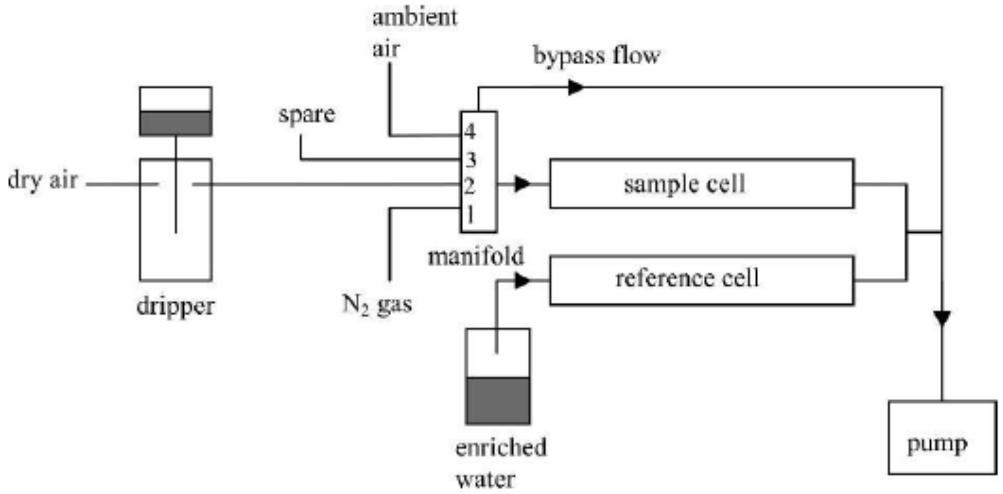


图 A2　水汽同位素TDL系统模式图

Figure A2　A schematic diagram of the TDL system for water vapor isotopes

零点标定采用超高纯度氮气。通过四个进气孔的流速为0.25 L min^{-1} STP，由临界小孔控制。3和4号进气口可以采集不同高度上的空气样品，得到同位素垂直梯度，进而获得通量的同位素比[*Lee et al.*, 2005]。

Ultra-high-purity nitrogen gas is used for zero calibration. Flow rate through the four intakes is 0.25 L min^{-1} STP and is controlled by a critical orifice at the inlet. Intake 3 and 4 can be used to sample ambient air at different heights to give the vertical isotope gradient and therefore the flux isotope ratio [*Lee et al.*, 2005].

为了减少水汽在样品管表面的吸附，分析仪的不锈钢样品管加衬聚乙烯管。步骤切换后，分析仪可以在 3 秒内达到 99.8%，与未衬里的样品管相比，步骤变换误差减少了 1/5。所有内部和外部的样品管都是金属－塑料合成成分(Synflex 1300, Saint-Gobain Performance Plastics, Wayne, NJ)。由高密度外套和乙烯共聚物内层保护的重叠铝芯，使得该管具有非常低的渗透性。

$H_2{}^{16}O$ 和 $H_2{}^{18}O$ 含量为 0 时典型的 10 Hz 噪声分别约为 2ppm 和 8ppb，$H_2{}^{16}O$ 含量为 12 mmol mol^{-1}、$H_2{}^{18}O$ 含量为 45 μmol mol^{-1} 时分别增加到 23ppm 和 45ppb。

(2) 校准方法

分析以用高纯氮气作为零气。用滴定系统制作标准气体。已知同位素浓度(-6.66%)的水滴入加热并充有干空气的蒸发瓶中。控制干空气的流量，这样瓶中湿空气的水汽混合比与环境空气混合比相当，在 10%以内。标准气和环境空气的混合比接近，将 $H_2{}^{16}O$ 稀释、增压影响和非线性问题的可能降到最小。还要确保进入瓶中的水瞬间蒸发。这样，瓶中湿空气与供给的液态水中的同位素比 R_d 一样。测试表明滴定系统可以处理较大范围的同位素比变化：从 0.8 到 30 mmol mol^{-1}。

假设 x_i 为第 i 个进气口(i=1-4)对应的 TDL 输出(未校准的体积混合比)。进气口分布如图 A2 所示，零补偿和增益校正依据下式：

$$R = R_d \frac{(x_2^{16} - x_1^{16})/(x_2^{18} - x_1^{18})}{(x_4^{18} - x_1^{16})/(x_4^{16} - x_1^{16})} \tag{A2.1}$$

其中，R 为进入第 4 个进气口吸入的环境空气的同位素摩尔浓度，上标 16 和 18 分别表示 $H_2{}^{16}O$ 和 $H_2{}^{18}O$ 分子。同位素比校准不需要两种同位素的收益因子。(TDL 测量可以与另一个标准比较来获得校准水汽的混合比)。同位素摩尔浓度用 δ 符号表示。

(3) 蒸腾 ^{18}O-H_2O 含量 δ_{ET} 的计算

冠层蒸腾 ^{18}O-H_2O 含量 δ_{ET} 的测量方法为：用经过测试的可调谐二极管激光吸收光谱测量水汽同位素含量的垂直梯度[*Griffis et al.*, 2005b; *Lee et al.*, 2007]，然后用通量－梯度法测量冠层 δ_{ET}[*Brunel et al.*, 1992; *Wang and Yakir*, 2000; *Wang*, 2000; *Yakir and Sternberg*, 2000]。简单地讲，用 TDL 测量两个高度上的 $H_2{}^{16}O$ 和 $H_2{}^{18}O$ 垂直梯度。取样高度在生长季初期分别为 75 和 185cm，后期随作物高度增加，分别升高到 108 和 198cm。计算每小时 ET 的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比 R_{ET}，

$$R_{ET} = R_d \frac{x_{s,2}^{16} - x_{s,1}^{16}}{x_{s,2}^{18} - x_{s,1}^{18}} \frac{x_{a,1}^{18} - x_{a,2}^{18}}{x_{a,1}^{16} - x_{a,2}^{16}} \tag{A2.2}$$

其中 R_d 是滴流标定水的 $^{18}O/^{16}O$ 摩尔比，x 是不同同位素组成水的混合比，上标 16 和 18 分别表示 ^{16}O 和 ^{18}O 原子；s_1、s_2 表示进行范围标定的水汽流，a_1、a_2 为高度 1(上部)和高度 2(下部)外界空气取样。当水汽混合比的垂直梯度为 0 时，R_{ET} 是没有定义的。[*Lee et al.*, 2005; *Lee et al.*, 2006]介绍的“动态标定”系统，使我们可以用绝对水

含量来对 TDL 测量值的非线性问题进行校正。同位素比用 δ 符号表示，标准水样为 V-SMOW 标准。测量 δ_v 的精度约为 0.2 %，δ_{ET} 的精度约为 1.4 %[*Lee et al.*, 2007]。主导项 $R_d(x_{s,2}^{16}-x_{s,1}^{16})/(x_{s,2}^{18}-x_{s,1}^{18})$ 实质上是标定指数，整个观测季节内的变化范围为 1.10 至 1.35。

图 A3 冠层尺度 ^{18}O-H_2O 的可调谐二极管激光系统通量－梯度法观测

Figure A3 Photograph of the flux-gradient method and tunable diode laser system for canopy scale ^{18}O-H_2O measurement

由于没有测量冠层内部的 δ_v，在计算通量同位素比时，我们无法直接测量或校正存储项[*Griffis et al.*, 2004]。因而将低层气体样品的同位素通量比的变化代替冠层存储项($\delta_{storage}$)。季节尺度和日尺度上，δ_{ET} 和 $\delta_{storage}$ 之间都不存在偏差。我们剔除了风浪区不好、降水和测量不稳定等时段的 δ_{ET} 数据。

A2.3 ^{18}O-CO_2 通量观测的理论和方法

(1) 生物圈－大气圈 CO_2 同位素交换的质量守恒原则

生态系统净 CO_2 交换(F_N)两个相反过程生态系统总光合(F_{GEP})和生态系统总呼吸(F_{TER})的差异，

$$F_N = F_{GEP} + F_{TER} \tag{A2.3}$$

$C^{18}O^{16}O$ 交换(F_N^x)的同位素质量守恒可以写为

$$F_N^{18} = F_{GEP}^{18} + F_{TER}^{18} \tag{A2.4}$$

其中 F_{GEP}^{x} 和 F_{TER}^{x} 分别是生态系统总光合和总呼吸的同位素通量。实际应用中，人们往往关注冠层净光合作用($F_A = F_{GEP} + F_L$)和非叶片部分生态系统呼吸作用($F_R = F_{TER} - F_L$)，希望用同位素手段将二者分开计算(Lloyd 等 1996；Zobitz 等 2007)，

$$F_N = F_A + F_R \tag{A2.5}$$

$$F_N^{18} = F_A^{18} + F_R^{18} \tag{A2.6}$$

目前为止，对 F_N^{18} 的测量还很少见，因为常规测量很难得到与大气研究要求的频率相当的可靠的同位素混合比[*Bowling et al.*, 1999; *Bowling et al.*, 2001]

上式的同位素质量平衡可以近似表示为[*Bowling et al.*, 2003b]

$$R_N^{18} F_N = R_A^{18} F_A + R_R^{18} F_R \tag{A2.7}$$

其中，R_N^{18}、R_A^{18} 和 R_R^{18} 分别表示净生态系统 CO_2 交换、净生态系统光合作用和非叶片生态系统呼吸作用的同位素比的绝对值，即 $R^{18}={}^{18}O/{}^{16}O \approx {}^{18}O/({}^{16}O+{}^{18}O)$。实际应用中，使用 δ^{18}。

同位素质量守恒方程可以改写为

$$F_\delta^{18} = \delta_A^{18} F_A + \delta_R^{18} F_R = (\delta_a^{18} - \Delta^{18}) F_A + \delta_R^{18} F_R \tag{A2.8}$$

其中 $F_\delta^{18} = \delta_N^{18} F_N$ 是同位素通量，是通量和同位素浓度的乘积。δ_a^{18}、δ_A^{18} 和 δ_R^{18} 分别是冠层空气、净生态系统光合通量和生态系统呼吸通量的同位素含量，Δ^{18} 是通量权重的冠层光合作用判别。同位素通量的符号与 F_N 相反，作物生长季同位素通量白天为正，即增加大气中 $C^{18}O^{16}O$ 含量，夜间或非生长季，同位素通量为负，减少大气中 $C^{18}O^{16}O$ 含量。

(2) 涡度相关同位素通量方法

为了对一些标量传输定量化，通常采用涡度相关法(*Leuning and Judd*, 1996)。根据 Reynolds 分解和平均方法，F_N 可以由下式确定，

$$F_N = \overline{\rho_a}\,\overline{w'c'} + S_c = \overline{\rho_a}\int C_{wc}(f)df + S_c \tag{A2.9}$$

其中 ρ_a 为干空气摩尔浓度，w 为垂直风速，c 为总 CO_2 摩尔混合比，$\overline{w'c'}$ 为 w 和 c 的平均协方差。相应的，可以用垂直风速波动的同谱密度和 CO_2 混合比(C_{WC})来计算 F_N，f 是湍流振荡频率。S_c 为地表与 EC 测量高度之间总 CO_2 储量的变化速度。

测量中的最大挑战就是确定同位素通量 F_N^{18}，

$$F_N^{18} = \overline{\rho_a}\,\overline{w'c^{x}}' + S_c^{18} = \overline{\rho_a}\int C_{wc^{18}}(f)df + S_c^{18} \tag{A2.10}$$

其中 $\overline{w'c^{18}}'$ 是 w 和 $C^{18}O^{16}O$ 摩尔混合比的协方差，S_c^{18} 是地面到 EC 测量高度之间的

$C^{18}O^{16}O$ 变化速率。$C_{wc^{18}}$ 是垂直风速波动和 $C^{18}O^{16}O$ 混合比的同谱密度。

我们经常用通量组分的同位素信号来诊断生物圈过程和功能。本文中，可以用 EC 通量比来计算 F_N 的同位素信号

$$R_N^{18} = \frac{\overline{w'c^{18}{}'}}{\overline{w'c'}} \tag{A2.11}$$

其中，摩尔比 R_N^x 从轻和重同位素的涡度相关项计算得来，可以转换成 delta 来表达，

$$\delta_N^x = 1000\left(\frac{\overline{w'c^{18}{}'}/\overline{w'c'}}{R_{VPDB}^{18}} - 1\right) \tag{A2.12}$$

在无光合作用条件下，计算的通量比为总生态系统呼吸的同位素比，$\delta_R^{18} = \delta_N^{18}$。为表达方便，用 delta 符号和同位素通量($F_\delta^{18} = \delta_N^{18} F_N$)，但观测是在公式 A2.9 的基础上进行的。需要用 International Union of Pure and Applied Chemistry, Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances 推荐的 VPDB 标准(即参考物质 8544，NBS19)对同位素摩尔混合比进行转换。

用 TDL (TGA100A, Campbell Scientific Inc., Logan, Utah, USA) 方法测量 $C^{16}O_2$ 和 $C^{18}O^{16}O$ 混合比。*Bowling* 等[2003b]首次提出用该系统测量碳同位素含量。本文采用的是为应用 EC 而设计的升级的分析仪和采样系统。不同同位素组成的 CO_2 具有特定的吸收谱线，可以用中红外波谱发进行选择和测量。为选择谱线，需要将样品室气压降低(1.6kPa)，从而减少压力增宽效应。本试验中，$C^{16}O_2$ 和 $C^{18}O^{16}O$ 的红外吸收谱线为 2311.756 和 2311.972 cm^{-1}，每次测量耗时 2 ms(总测量频率为 500 Hz)。如果在这 2 ms 内浓度变化很快，则这 2 ms 的滞后会引起比较大的误差。为避免这个问题，用数字滤波对测量进行同步，相应的处理滞后为 $C^{16}O_2$ 746 ms、$C^{18}O^{16}O$ 742 ms。在此试验中，为了保持高频观测，采用 5 Hz 的 EC 滤波器通带，为避免混叠，数据记录频率为 20Hz。这样，在事后处理过程中，可以进行数字滤波，来估算降低噪声和频率相应之间的权衡比。

(3) 空气取样、标定方案和数据处理方法

EC 进气口距离声波风速计 0.1 米，取样速率为 25.0 L min^{-1}，气体样品经过一个 10 微米的聚丙烯过滤器、一个 47mm 过滤器(Pall Corporation 1235, NY, USA)、一个萘烷干燥器(PD1000，Perma Pure Inc., NJ, USA)和 Synflex 管(Synflex Type 1300, 6.25 mm O.D. ×1.0mm wall, Aurora, OH, USA)，然后进入与真空泵(RB0021, Busch Inc., Virginia Beach, VA, USA)相连的常规采样系统。采样系统在 EC 进入的空气样品和三个校准气罐中切换采样。用另外一个 Busch 真空泵从采样系统中进行二次取样，并将样品注入 TDL，用质量流量控制器(16M Series, Alicat Scientific, AZ, USA)将流量控制为 3 L min^{-1}。在质量流量控制器和 TDL 之间有较小的萘烷干燥器(PD625 Perma Pure

Inc.)，以确保空气和标准样品的湿度相同。5Hz 的数字滤波滞后 0.744 s，物理取样的滞后 0.66 s，因此声波风速计和 TDL 的信号之间有 1.4s 的时间滞后(相当于 20Hz 的频率下采集 28 个样品)。

用已知同位素比例、浓度为 300、450 和 700μmol mol^{-1} 的 CO_2 进行三点标定，时间间隔为 5 分钟。每个 5 分钟周期中，对标定气体取样 10s，然后对二次取样的空气流取样 270s。为避免上一种气样残留引起误差，将气阀切换后的 4s(20Hz 频率下 80 个样本)忽略。所有的数据记录频率为 20Hz。对标准气测量进行线性或二次校准，来确定空气样的混合比。

由于采样管的衰减效应，激光 EC 系统测量的 CO_2 通量比开路式涡度相关系统低，因此本文中将 EC-TDL 测量的 ^{18}O-CO_2 通量值提高 10%。

图 A4　涡度相关和可调谐二极管激光(EC-TDL)系统

Figure A4　Photograph of the eddy covariance and tunable diode laser (EC-TDL) system

试验站点为 University of Minnesota, Rosemount Research and Outreach center, ^{18}O-CO_2 通量测量时间为 2006 年 7 月 18 日至 9 月 20 日，大豆生长季。Experimental site was at the University of Minnesota, Rosemount Research and Outreach center, during the 2006 growing seaon. Isotopic flux measurements were made over a soybean canopy from 18 July to 20 September 2006.

致　谢

文中使用数据来自耶鲁大学森林与环境学院生物气象学研究组和明尼苏达大学土壤、水与气候系生物气象学研究组的合作研究，特别感谢耶鲁大学博士后 Lisa R. Welp 和博士生 Kyounhee Kim，以及明尼苏达大学副教授 Timothy J. Griffis 在模型建立和论文撰写中提供的宝贵意见。

感谢我的三位导师：中国科学院地理科学与资源研究所于强研究员、孙晓敏研究员和美国耶鲁大学森林与环境学院李旭辉教授，他们对我的教诲，令我受益终生。特别地，本论文在李旭辉老师的直接指导下完成，老师在此倾注了很多心血。我对他们的感激之情无以言表，决心用日后的工作成绩回报他们的厚爱。

感谢开题报告、中期考核、论文盲审和答辩过程中对论文提出中肯评价和宝贵意见的评审老师们。

感谢中国科学院地理科学与资源研究所和南京信息工程大学所有曾经向我传授知识的老师们，是他们的谆谆教导奠定了我的知识基础。感谢中国科学院地理科学与资源研究所研究生部、图书馆、医务室等为我的生活和学习提供过帮助的老师们。感谢课题组李俊老师、鲁全国老师和许守华研究助理，以及所有课题组成员对我的帮助。

感谢我的爷爷、奶奶、爸爸、妈妈、叔叔、姐姐，我的先生张小磊，以及所有亲人这么多年对我的支持和关爱。感谢我所有的朋友和同学们一路的陪伴和鼓励。

作者简历

一、 基本情况

肖薇，女，1982 年 5 月出生，籍贯黑龙江省绥化市，博士研究生

二、 学习工作经历

2006.9-2009.7	中国科学院地理科学与资源研究所	博士研究生
2008.1-2009.1	耶鲁大学森林与环境学院	访问学者
2005.7-2006.8	广东省气象局	天气预报员
2002.9-2005.6	南京信息工程大学	硕士研究生
1998.9-2002.6	南京信息工程大学	本科生

三、 参加科研项目

1、 中国科学院国际合作计划“人类活动与生态系统变化”资助项目 CXTD-Z2005-1；

2、 美国国家科学基金项目(资助项目 DEB-0514908)：生态系统－大气之间氧同位素通量和判别机制；

3、 美国国家科学基金项目(资助项目 DEB-0514904)：水文学和生态学研究中水汽同位素交换实地观测系统的开发和应用；

4、 Rice Family Foundation ：人工和自然生态系统中温室气体通量；

5、 科技部“973 项目”：干旱区绿洲化、荒漠化过程及其对人类活动、气候变化的响应与调控；

6、 科技部“863 计划”探索导向类项目：华北平原粮食作物生产力和水资源利用分析系统（GIS-ChinaAgrosys）；

7、 科技部“863 计划”探索导向类项目：华北平原作物水分过程与产量形成的协同模型；

8、 国家自然科学基金项目(40175029)、海外青年学者合作研究基金项目(4000028503)、江苏省“333”工程资助项目：紫外辐射对农田生态系统的影响；

四、 获奖情况

[博士期间]

2008 年　中期考核评为优秀，并获中国科学院一等学习奖学金
2007 年　国家留学基金全额资助赴美国 Yale University 访问一年
2007 年　“中国科学院三好学生”荣誉称号（2006－2007 学年）

［其　　他］

2006 年　　江苏省优秀硕士学位论文

2002 年　　南京信息工程大学优秀毕业生，免试硕士研究生资格

1998－2002 年　多次获得一等优秀学生奖学金及“三好学生”称号

五、 发表论文

［博士期间］

1. **Wei Xiao**, Xuhui Lee, Timothy J. Griffis, Kyounghee Kim, Lisa Welp, QiangYu, Using a simple isotopic land surface model (SiLSM) to investigate the controls and sensitivity of oxygen isotopic CO_2 and H_2O exchange, *Journal of Geophysical Research*, in review. (SCI)

2. **Xiao W.,** G. N. Flerchinger, Q. Yu, Youfei Zheng. 2006. Evaluation of the SHAW model in simulating the components of net all-wave radiation. *Transactions of the ASABE*, 49: 1351-1360. (SCI)

3. Flerchinger G. N., **W. Xiao**, T. J. Sauer, Q. Yu. Simulation of Within-Canopy Radiation Exchange, *NJAS - Wageningen Journal of Life Sciences*, in revision. (SCI)

4. Flerchinger G. N., **W. Xiao**, T. J. Sauer, Q. Yu. 2009. Comparison of algorithms for incoming atmospheric long-wave radiation, *Water Resources Research*, 45, W03423, doi:10.1029/2008WR 007394.（SCI）

5. Flerchinger G. N., **W. Xiao** and Q. Yu. 2006. Evaluation of the SHAW model for within-canopy radiation exchange. *ASA-CSSA-SSSA international meetings*, Paper Number: 062011.

［其　　他］

6. **Xiao, W.**, G. N. Flerchinger, Q. Yu, Y. Zheng. 2006. Evaluation of SHAW model in simulating energy balance, leaf temperature and micrometeorological variables within a maize canopy. *Agronomy Journal*, 98: 722-729. (SCI)

7. Zheng, Y., W. Gao, C.H. Wang, **W. Xiao**, and R.H. Zhang. 2003. Effect of increased UV-B on weeds and big worms in farmland ecological system, *Proc. SPIE, 5156*, 273-280.

8. **肖薇**，郑有飞，于强. 2005. 基于 SHAW 模型对农田小气候要素的模拟. 生态学报, 25(7): 1626-1634.

9. 徐建强，**肖薇**，张荣刚，王传海，郑有飞. 2004. UV-B 辐射增强对小麦籽粒化学组分的影响. 环境化学，23(3):258-262.

10. 王连喜，**肖薇**，王传海，苏占胜，李福生.2004 南京和宁夏地区 UV-B 辐射增强对小麦影响的对比研究. 农业环境科学学报, 23 (1):34-38.

11. 张荣刚，郑有飞，何雨红，**肖薇**. 2003. 紫外 UV-B 辐射增强对麦田蚜虫的影响. 南京气象学院学报 26(2): 258-262.