



西北农林科技大学

博士学位论文

多尺度叶绿素荧光与光合干旱胁迫响应机理及作物模型融合方法

学科专业 土地资源与空间信息技术
研究方向 作物模型与遥感
论文作者 王亚凯
指导教师 吕肖良 研究员
联合指导教师 于强 研究员
论文提交时间 2023年5月23日

Dissertation Submitted to Northwest A&F University
in Partial Fulfillment of the Requirements
for Degree of
Doctor of Philosophy

Multi-scale Chlorophyll Fluorescence and
Photosynthetic Response Mechanisms to
Drought Stress and Integration Methods with
Crop Model

Major: Land Resources and Spatial Information Technology

Research Field: Crop Model and Remote Sensing

Candidate: Yakai Wang

Supervisor: Prof. Xiaoliang Lu

Co-Supervisor: Prof. Qiang Yu

Date of submission: 2023.05.23

College of Natural Resources and Environment
Northwest A&F University

分类号: S127

UDC: 631

密级: 公开

学校代码: 10712

研究生学号: 2019060333

西北农林科技大学博士学位论文

多尺度叶绿素荧光与光合干旱胁迫响应机理及作物模型融合方法

论文作者: 王亚凯

指导教师: 吕肖良 研究员 于强 研究员

指导小组:

答辩委员会:

西北农林科技大学水利与建筑工程学院李毅研究员 (主席)

西北农林科技大学水利与建筑工程学院何建强教授

西北农林科技大学资源环境学院齐雁冰教授

中国农业大学资源与环境学院王靖教授

中国农业大学土地科学与技术学院冯璞玉副教授

答辩日期: 2023 年 05 月 17 日

本研究得到国家自然科学基金面上项目“作物日光诱导叶绿素荧光与光合作用对环境胁迫的协同响应及多尺度关联机制估算”（编号：42071328）资助。

研究生学位论文的独创性声明

本人声明：所呈交的学位论文是我个人在导师指导下独立进行的研究工作及取得的研究结果；论文中的研究数据及结果的获得完全符合学校《关于规范西北农林科技大学研究生学术道德的暂行规定》，如果违反此规定，一切后果与法律责任均由本人承担。

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结果，也不包含其他人和自己本人已获得西北农林科技大学或其它教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同事对本研究所做的任何贡献均已在论文的致谢中作了明确的说明并表示了谢意。

研究生签名：王亚凯

时间：2023年 5 月 19 日

导师指导研究生学位论文的承诺

本人承诺：我的研究生王亚凯所呈交的学位论文是在我指导下独立开展研究工作及取得的研究结果，属于我现岗职务工作的结果，并严格按照学校《关于规范西北农林科技大学研究生学术道德的暂行规定》而获得的研究结果。如果违反学校《关于规范西北农林科技大学研究生学术道德的暂行规定》，我愿接受按学校有关规定的处罚处理并承担相应导师连带责任。

导师签名：吕肖良

时间：2023年 5 月 22 日

关于研究生学位论文使用授权的说明

本学位论文的知识产权归属西北农林科技大学。本人同意西北农林科技大学保存或向国家有关部门或机构送交论文的纸质版和电子版，允许论文被查阅和借阅；同意西北农林科技大学将本学位论文的全部或部分内 容授权汇编录入《中国博士/硕士学位论文全文数据库》和《中国学位论文全文数据库》进行出版，并享受相关权益。

本人保证，在毕业离开（或者工作调离）西北农林科技大学后，发表或者使用本学位论文及其相关的工作成果时，将以西北农林科技大学为第一署名单位，否则，愿意按《中华人民共和国著作权法》等有关规定接受处理并承担法律责任。

任何收存和保管本论文各种版本的其他单位和个人(包括研究生本人)未经本论文作者的导师同意，不得有对本论文进行复制、修改、发行、出租、改编等侵犯著作权的行为，否则，按违背《中华人民共和国著作权法》等有关规定处理并追究法律责任。

（保密的学位论文在保密期限内，不得以任何方式发表、借阅、复印、缩印或扫描复制手段保存、汇编论文）

研究生签名：王亚凯 时间：2023年5月19日

导师签名：吕肖良 时间：2023年5月22日

摘要

在日益变暖、降水量减少的全球大背景下，干旱灾害会严重威胁区域作物产量，作物模型可用于预测与评价气候变化对作物产量的影响。作物模型由于需要大量田间实测数据进行参数校准，多用于农田尺度模拟，在区域上模拟存在较大的不确定性。日光诱导叶绿素荧光（SIF）是能直接监测区域作物光合生产力的新遥感指标。通过 SIF 与作物模型结合有助于约束作物模型的光合模拟过程，从而提高作物模型区域产量模拟能力。然而在胁迫环境下，存在尺度效应的 SIF 与植被的光合线性关系可能会发生解耦，直接利用 SIF 进行光合估算或与作物模型耦合在胁迫环境下会有较大的问题。

因此，本研究基于干旱胁迫下叶绿素荧光与光合响应机理，以荧光算法与农业生产系统模拟器（APSIM）作物模型耦合为核心，从光系统尺度、叶片尺度、冠层尺度以及区域尺度四个方面进行模拟与分析。在光系统尺度上，进行荧光激发谱的重构以及光系统 I（PSI）和光系统 II（PSII）荧光激发效率的分离，为光系统荧光建模提供理论基础；在叶片尺度上，基于室内干旱实验分析不同程度干旱胁迫对玉米叶片叶绿素荧光光谱、气体交换参数以及调制叶绿素荧光（PAM）参数的影响，可用于改进干旱胁迫环境下光合-荧光建模；在冠层尺度上，采用辐射传输模型进行农田冠层荧光逃逸概率模拟并对其影响因素进行分析，基于已有理论知识和本研究在胁迫环境下的研究结果，开发并改进 APSIM-SIF 模型以提高模型在干旱胁迫环境下的适用性；在区域尺度上，应用 APSIM-SIF 模型对美国中西部进行 SIF 模拟，利用 TROPOMI SIF 数据进行验证，同时通过遥感 SIF 数据约束 APSIM-SIF 模型对区域的作物产量进行模拟。本论文的主要研究结果和结论如下：

（1）叶片发射的全波段 SIF 转换为冠层顶单波段 SIF 机理方法

利用荧光激发矩阵计算 SIF 波段转换因子（ ϵ ）和基于光谱不变理论估算荧光逃逸概率（ f_{esc} ），可以将叶片全波段 SIF 转换到冠层顶单波段 SIF。 ϵ 和 f_{esc} 可以分别表示叶片生理状态和作物冠层结构特性。 ϵ 可以使用叶片生化参数输入到 FLUSPECT 模型通过荧光激发矩阵的计算；近红外 SIF 的 f_{esc} 可以表达为近红外定向反射率（ R_{NIR} ）、归一化植被指数（NDVI）和光合有效辐射分量（ f_{APAR} ）的函数。敏感性结果显示在近红外波段叶绿素浓度是 ϵ 的主要驱动因素，可以解释超过 80% 的 ϵ 变异。区域模拟结果表明 f_{esc} 在作物生长高峰期基本保持恒定。

（2）基于 FLUSEPCT 模型光系统荧光激发谱重构与激发效率分离方法

利用奇异值分解（SVD）方法对荧光激发谱进行样本权重和奇异向量的分离，分解

结果表明前三个主成分可以解释超过 90% 的光谱变异, 基于非光化学淬灭系数 (NPQ)、净光合速率和前三个主成分就可以对荧光激发谱进行重构。将重构的荧光激发谱整合到 FLUSPECT 模型改善了其在光、温、CO₂ 环境下的荧光光谱模拟准确性 ($R^2 > 0.9$)。采用线性回归方法确定了 PSII 荧光激发效率和 PAM 测量的 PSII 荧光量子产量的转换系数为 0.87。短期光强变化下 PSII 荧光激发效率在弱光下达到最高值 0.012, 之后随着光强的增加而降低, 而 PSI 荧光激发效率基本保持稳定, 在强光下 PSI 荧光激发效率对总荧光激发效率的贡献可到 1/3。

(3) 基于干旱胁迫叶片实验提高胁迫条件下叶绿素荧光与光合线性关系

干旱胁迫下叶片水平叶绿素荧光 (ChlF) 与光合线性关系会解耦。随着土壤含水量的降低, 不同光强下光合速率的变化与气孔导度和电子传递速率的变化趋势一致, 均存在明显的土壤水分阈值, 而 ChlF 随着土壤含水量的降低荧光下降并不明显, 红光波段的 ChlF 甚至还会上升, 因此在持续干旱胁迫下, ChlF 与光合速率的线性关系很低 ($R^2 < 0.2$)。基于电子传递速率公式, 通过引入 PSII 反应中心开放程度 (q_L) 参数可以明显提高干旱胁迫条件下有约束的叶绿素荧光 ($\text{ChlF} \times q_L$) 对光合的估算能力 ($R^2 > 0.9$)。

(4) 基于冠层辐射传输模型农田冠层荧光逃逸概率模拟与影响因素

利用一维 SCOPE 荧光模型研究观测方向对冠层荧光逃逸概率的影响, 结果表明方向性荧光逃逸概率受到叶倾角分布函数 (LIDF)、观测角度以及叶面积指数 (LAI) 的影响较大, 而半球性荧光逃逸概率主要与 LAI 和 LIDF 有关, 在假设农田冠层 LIDF 为球状分布时, 可以通过 LAI 以及不同波段的反射系数和消化系数进行全波段半球性荧光逃逸概率的准确模拟 ($R^2 > 0.95$), 对于方向性荧光逃逸概率可以基于 $R_{NIR} \cdot \text{NDVI} / f_{APAR}$ 进行估算 ($R^2 = 0.89$)。通过在 DART 模型中设置不同株距和行距的作物种植场景进行三维辐射传输模拟, 结果表明高种植密度下, 土壤反射率对荧光逃逸概率影响较低, 而低种植密度下, 土壤反射率有显著影响; 相比株距, 行距对冠层荧光逃逸概率影响较大。

(5) APSIM-SIF 模型构建与改进

本研究在 APSIM 模型框架下, 开发了一个 SIF 模块将作物冠层光合生产力 (GPP) 与冠层顶 SIF (SIF_{toc}) 耦合起来。APSIM-SIF 模型在美国中西部两个农业站点进行验证, 可以预测超过 90% 的 GPP、地上部生物量和 LAI 的变异, 并且在中国的玉米灌溉站点中很好地捕获了作物生长季 SIF_{toc} ($R^2 = 0.84$) 和 GPP ($R^2 = 0.81$) 的变化。对于农作物面积超过 70% 的栅格点, 模拟的 SIF_{toc} 解释了超过 75% 的卫星观测 SIF 的变异。本研究基于机理光响应模型 (MLR) 方法对 APSIM-SIF 的光合-荧光耦合系统进行了改进, 并从叶片尺度模拟降尺度到光系统尺度模拟, 验证结果表明改进的 APSIM-SIF 模型极大改善了作物冠层总 SIF 的模拟精度 ($R^2 > 0.9$, $\text{RRMSE} < 20\%$), 并提高了对于干旱胁迫的响应能力, 基于 MLR 方法的 APSIM-SIF 模拟作物产量与美国国家农业统计

局县域作物产量有较高的相关性，相关性最高为 0.78，模拟误差最低为 748 kg ha^{-1} 。

本研究结论如下：在光系统尺度使用重构荧光激发谱有助于改进不同环境下叶片荧光光谱模拟；在叶片尺度进行荧光-光合建模中引入 q_L 参数可以明显提高胁迫环境荧光对光合的估算能力；在冠层尺度 LAI 和 LIDF 对冠层早期荧光逃逸概率影响较大，而在作物高峰期逃逸概率基本保持稳定；在区域尺度上 APSIM-SIF 模型可以准确模拟区域 SIF 时空变化趋势，将叶片荧光模拟降尺度到光系统尺度并引入 q_L 参数有助于增强 APSIM-SIF 模型对于干旱胁迫响应敏感程度，并提高对区域作物产量的模拟能力。

关键词：叶绿素荧光；作物模型；光合作用；干旱；荧光逃逸概率

ABSTRACT

In the context of global warming and decreasing precipitation, drought disasters pose a serious threat to regional crop yields. Crop models can be used to predict and evaluate the impact of climate change on crop yields. However, because crop models require a large amount of field measurement data for parameter calibration, they are mostly used for field-scale simulation, and there is considerable uncertainty in simulating at the regional level. Solar-induced chlorophyll fluorescence (SIF) is a new remote sensing indicator that can directly monitor the photosynthetic productivity of regional crops. Combining SIF with crop models can help constrain the photosynthetic simulation process of crop models, thereby improving the regional yield simulation ability of crop models. However, under stress conditions, the linear relationship between SIF with scale effects and vegetation photosynthesis may become decoupled, and there may be significant issues with directly using SIF for photosynthetic estimation or coupling with crop models under stress conditions.

Therefore, based on the chlorophyll fluorescence and photosynthetic response mechanisms under drought stress, this study coupled fluorescence algorithms with the Agricultural Production Systems sIMulator (APSIM) crop model as the core, and conducted simulations and analyses from four aspects: the photosystem scale, leaf scale, field scale, and regional scale. At the photosystem scale, the fluorescence emission spectra were reconstructed, and the fluorescence quantum efficiency of photosystem I (PSI) and photosystem II (PSII) were separated, providing a theoretical basis for modeling photosystem fluorescence. At the leaf scale, changes in the chlorophyll fluorescence spectrum, gas exchange parameters, and Pulse amplitude modulated (PAM) fluorescence parameters of maize leaves under different degrees of drought stress were analyzed based on indoor drought experiments, which can be used to improve the photosynthesis-fluorescence modeling under stress conditions. At the field scale, the simulation of canopy SIF escape probability in farmland and the analysis of its influencing factors were carried out. Based on existing theoretical knowledge and research results under stress conditions, the APSIM-SIF model was developed and improved to enhance its applicability under drought stress. At the regional scale, the APSIM-SIF model was applied to simulate SIF in the Midwest region of the United States, validated using TROPOMI SIF data, and used to simulate crop yields in the region by constraining the APSIM-SIF model with remote sensing SIF data. The main research results and conclusions of this paper are as

follows:

(1) Mechanism for converting full-spectrum SIF emitted by leaves to single-band SIF at the top of the canopy

By using the fluorescence excitation matrix to calculate the SIF band conversion factor (ε) and the spectral invariance theory to estimate the fluorescence escape probability (f_{esc}), the full-spectrum SIF emitted by leaves can be converted to single-band SIF at the top of the canopy. ε and f_{esc} can respectively represent the physiological state of the leaves and the structural characteristics of the plant canopy. ε can be calculated using biochemical parameters inputted into the FLUSPECT model through the excitation-fluorescence matrices calculation. The f_{esc} of near-infrared SIF can be expressed as a function of directional reflectance in the NIR region (R_{NIR}), normalized difference vegetation index (NDVI), and the fraction of absorbed photosynthetically active radiation (f_{APAR}). Sensitivity analysis results show that chlorophyll concentration is the main driving factor of ε in the NIR region, which can explain more than 80% of the variation in ε . Regional simulation results show that f_{esc} remains relatively constant during the crop growth peak period.

(2) Reconstruction of the photosystem fluorescence emission spectrum and separation of the fluorescence quantum efficiency based on the FLUSPECT model

Using the singular value decomposition (SVD) method to separate sample weights and singular vectors of the fluorescence emission spectrum, the decomposition results show that the first three principal components can explain more than 90% of the spectral variability. Based on non-photochemical quenching (NPQ), net photosynthesis rate, and the first three principal components, the fluorescence spectrum can be reconstructed. Integrating the reconstructed fluorescence emission spectrum into the FLUSPECT model improves its accuracy in simulating fluorescence spectra under light, temperature, and CO₂ environments ($R^2 > 0.9$). The conversion coefficient between PSII fluorescence quantum efficiency and the PSII fluorescence yield measured by PAM is determined to be 0.87 using linear regression. Under short-term changes in light intensity, the PSII fluorescence quantum efficiency reaches its highest value of 0.012 in weak light and then decreases with increasing light intensity, while the PSI fluorescence quantum efficiency remains stable and contributes up to 1/3 of the total fluorescence quantum efficiency under strong light.

(3) Improving the linear relationship between chlorophyll fluorescence and photosynthesis under drought stress based on leaf-level experiments

Under drought stress, the linear relationship between chlorophyll fluorescence (ChlF) and photosynthesis is decoupled at the leaf level. As the soil moisture content decreases, the

changes in photosynthesis rate under different light intensities show a consistent trend with stomatal conductance and electron transfer rate, all exhibiting a distinct threshold of soil water content. However, the decrease of ChlF with decreasing soil moisture content is not significant, and even in the red band, ChlF may increase. Therefore, under sustained drought stress, the linear relationship between ChlF and photosynthesis rate is very low ($R^2 < 0.2$). Based on the electron transfer rate formula, introducing the degree of openness of the PSII reaction center (q_L) parameter can significantly improve the estimation ability of constrained chlorophyll fluorescence ($\text{ChlF} \times q_L$) for photosynthesis under stress conditions ($R^2 > 0.9$).

(4) Simulation of canopy fluorescence escape probability and influencing factors in farmland based on the canopy radiative transfer models

Using the one-dimensional SCOPE model to study the effect of observation direction on canopy fluorescence escape probability, the results show that directional fluorescence escape probability is greatly influenced by leaf inclination angle distribution function (LIDF), observation angle, and leaf area index (LAI), while hemispherical fluorescence escape probability is mainly related to LAI and LIDF. Assuming that the LIDF of the farmland canopy is spherically distributed, the accurate simulation of hemispherical fluorescence escape probability can be achieved by LAI and the scattering and absorption coefficients of different bands ($R^2 > 0.95$). The directional fluorescence escape probability can be estimated based on $R_{NIR} \cdot \text{NDVI} / f_{APAR}$ ($R^2 = 0.89$). By setting different crop planting scenarios with different plant and row spacing in the DART model for three-dimensional radiative transfer simulation, the results show that under high planting density, soil reflectance has a low impact on fluorescence escape probability, while under low planting density, soil reflectance has a significant impact. Compared with plant spacing, row spacing has a greater impact on canopy fluorescence escape probability.

(5) Construction and improvement of the APSIM-SIF model

We developed an SIF module within the APSIM model framework to couple crop canopy gross primary productivity (GPP) with top-of-canopy SIF (SIF_{toc}). The APSIM-SIF model was validated at two agricultural sites in the Midwest United States and was able to predict over 90% of the variation in GPP, aboveground biomass, and leaf area index (LAI). It also captured well the seasonal variation in SIF_{toc} ($R^2 = 0.84$) and GPP ($R^2 = 0.81$) at a maize irrigation site in China. For grid points where crops occupied more than 70% of the area, simulated SIF_{toc} explained over 75% of the variability in satellite-observed SIF. We improved the photosynthesis-fluorescence coupling system in the APSIM-SIF model based on the Mechanistic Light Response (MLR) method, and downscaled the leaf-level simulation to the

photosystem-level simulation. The results of validation showed that the improved APSIM-SIF model significantly improved the simulation accuracy of total canopy SIF ($R^2 > 0.9$, RRMSE $< 20\%$) and enhanced the response to drought stress. Based on the MLR method, the APSIM-SIF model simulated crop yield with a high correlation with the county-level crop yield of the National Agricultural Statistics Service, with the highest correlation being 0.78 and the lowest simulation error being 748 kg ha^{-1} .

The conclusions of this study are as follows: Using reconstructed fluorescence emission spectrum at the photosystem scale helps improve the simulation of leaf fluorescence spectra in different environments. Introducing the q_L parameter in fluorescence-photosynthesis modeling at the leaf scale significantly enhances the estimation ability of photosynthesis in stressful environments. At the canopy scale, LAI and LIDF have a significant impact on early canopy fluorescence escape probability, while fluorescence escape probability remains relatively stable during the crop's peak season. At the regional scale, the APSIM-SIF model accurately simulates the spatiotemporal variations of regional SIF. Downscaling leaf fluorescence simulation to the photosystem scale and introducing the q_L parameter contribute to enhancing the sensitivity of the APSIM-SIF model to drought responses and improving its capability to simulate regional crop yields.

KEY WORDS: chlorophyll fluorescence; crop model; photosynthesis; drought; fluorescence escape probability

目录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	V
符号和缩写说明.....	I
第一章 绪论.....	1
1.1 研究背景和意义.....	1
1.2 国内外研究进展.....	2
1.2.1 叶绿素荧光概况.....	2
1.2.2 叶绿素荧光建模过程研究进展.....	3
1.2.3 叶绿素荧光与光合关系研究.....	10
1.2.4 作物模型（APSIM）光合模拟与约束.....	13
1.2.5 荧光与光合耦合方法研究进展.....	14
1.3 研究中存在的问题.....	15
1.4 研究目标.....	16
1.5 研究内容.....	16
1.6 技术路线.....	17
第二章 材料与amp;方法.....	19
2.1 研究区域及数据来源.....	19
2.1.1 研究区域.....	19
2.1.2 站点 EC 通量和 SIF 数据.....	20
2.1.3 区域作物分布、土壤与气象数据.....	23
2.1.4 TROPOMI SIF 数据集.....	24
2.1.5 干旱指数.....	25
2.1.6 作物产量数据.....	25
2.2 APSIM 模型.....	26
2.3 APSIM-SIF 模型校准、优化与模拟.....	26
2.3.1 模型校准.....	26
2.3.2 敏感性分析.....	29
2.3.3 优化算法.....	30
2.3.4 情景模拟.....	30

2.4 叶片生理实验设备与实验设计	31
2.4.1 叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量设备	31
2.4.2 实验设计	33
2.5 辐射传输模型模拟	34
2.5.1 叶片荧光模型 (FLUSPECT) 模拟	34
2.5.2 冠层水平一维荧光辐射传输模型 (SCOPE) 模拟	36
2.5.3 冠层水平三维荧光辐射传输模型 (DART) 模拟	37
第三章 光系统荧光激发谱重构及荧光激发效率的分离	40
3.1 FLUSPECT 反演结果与默认参数比较	40
3.2 荧光激发谱的分解结果	42
3.3 荧光激发谱重构方法验证	44
3.4 光系统 I 和光系统 II 荧光激发效率变化	48
3.5 讨论	49
3.6 小结	50
第四章 提高干旱胁迫下叶片叶绿素荧光与光合线性关系	51
4.1 干旱胁迫对气体交换参数及荧光参数的影响	51
4.2 干旱胁迫下光系统能量分配的变化	53
4.3 干旱胁迫下生理参数约束对荧光-光合关系的改进	55
4.4 讨论	58
4.5 小结	60
第五章 农田冠层 SIF 逃逸概率模拟与影响因素分析	61
5.1 基于 SCOPE 模型模拟荧光逃逸概率	61
5.1.1 方向性和半球性荧光逃逸概率比较	61
5.1.2 方向性和半球性荧光逃逸概率全局敏感性分析	62
5.1.3 方向性和半球性荧光逃逸概率估算	64
5.2 基于三维 DART 模型模拟农田冠层荧光逃逸概率	67
5.3 讨论	68
5.4 小结	69
第六章 利用集成 APSIM 模型模拟作物冠层顶日光诱导叶绿素荧光	70
6.1 SIF 与作物模型耦合方法	70
6.1.1 DCaPST 模块	70

6.1.2 SIF 耦合 APSIM 作物模型过程 (APSIM-SIF)	71
6.1.3 将 SIF_{tot_full} 转换为 $SIF_{toc}(\lambda)$	73
6.1.4 APSIM-SIF 模拟	75
6.2 APSIM-SIF 模型荧光波段转换因子及敏感性分析	76
6.2.1 SIF 波段转换因子 (ε)	76
6.2.2 敏感性分析	78
6.3 APSIM-SIF 模型验证与区域模拟	79
6.3.1 DCaPST 模块验证	79
6.3.2 SIF 模块验证	81
6.3.3 区域模拟	82
6.4 讨论	85
6.4.1 从光合作用到 TOC SIF	85
6.4.2 模型限制	86
6.5 小结	86
第七章 提高 APSIM-SIF 模型干旱胁迫下模拟能力	87
7.1 APSIM-SIF 改进方法	87
7.1.1 PSII 荧光建模方法	87
7.1.2 PSII 到光系统水平总荧光转换	90
7.1.3 光系统水平荧光到叶片水平荧光转换	91
7.1.4 冠层荧光逃逸概率估算	92
7.2 APSIM-SIF 模型的评估	93
7.2.1 GPP 模拟评估	93
7.2.2 SIF_{tot} 模拟评估	94
7.3 基于两种荧光建模方法的 APSIM-SIF 模型模拟比较	95
7.3.1 SIF_{tot} 模拟的敏感性分析结果	95
7.3.2 不同情境下 GPP 和 SIF_{tot} 线性关系变化	97
7.3.3 不同干旱程度 APSIM-SIF 模拟的 SIF_{tot} 比较	100
7.3.4 不同荧光建模方法 APSIM-SIF 产量模拟比较	101
7.4 讨论	103
7.4.1 SIF 建模的不同参数化方案比较	103
7.4.2 模拟和观测的 SIF_{tot} -GPP 关系的比较	103
7.4.3 模型应用	104
7.5 小结	105

第八章 结论与展望	106
8.1 主要结论	106
8.2 论文创新点	107
8.3 不足与展望	108
参考文献	109
致谢	120
个人简介	122

符号和缩写说明

缩写 (符号)	英文	中文
ALA	Canopy-average leaf angle	冠层平均叶倾角
APAR	Absorbed Photosynthetically Active Radiation	冠层吸收的光合有效辐射能量
APSIM	Agricultural Production Systems sIMulator	农业生产系统模拟器
Cab	Chlorophyll a+b content	叶绿素含量
Cant	Anthocyanin content	花青素含量
Ccar	Total carotenoid content	类胡萝卜素含量
Cdm	Dry matter content	干物质含量
ChlF	Chlorophyll Fluorescence	叶绿素荧光
C_i	Intercellular CO ₂ concentration	胞间二氧化碳浓度
Cw	Water content	叶片等效水层
DART	The discrete anisotropic radiative transfer model	离散各向异性三维辐射传输模型
DCaPST	The diurnal canopy photosynthesis-stomatal Conductance model	冠层光合作用-气孔导度模块
DOY	Day of year	一年中的第几日
DSCI	Drought Severity and Coverage Index	干旱严重程度和覆盖指数
E	Transpiration rate	蒸腾速率
EC	Eddy Covariance	涡动协方差
EF	The leaf excitation-fluorescence matrices	叶片荧光激发矩阵
EOF	Empirical Orthogonal Function	经验正交函数分解
ETR	Photosynthetic Electron Transport Rate	光合电子传递速率
f_{APAR}	The fraction of absorbed photosynthetically active radiation	光合有效辐射分量
FCVI	Fluorescence Correction Vegetation Index	荧光校正植被指数
f_{esc}	Fluorescence escape probability	荧光逃逸概率
Fqe	Fluorescence quantum efficiency	荧光激发效率
GPP	Gross primary productivity	总初级生产力
g_{sw}	Stomata conductance	气孔导度
LAI	Leaf Area Index	叶面积指数
LIDF	Leaf Inclination Distribution Function	叶倾角分布函数
MLR	Mechanistic Light Response Model	机理光响应模型
N	Leaf mesophyll structure parameter	叶肉结构参数
NDVI	Normalized Difference Vegetation Index	归一化植被指数
NEE	Net Ecosystem Exchange	净生态系统碳交换量
NIRv	Near-Infrared Reflectance of Vegetation	植被近红外反射率

NPQ	Non-Photochemical Quenching	非光化学淬灭
PAM	Pulse-Amplitude-Modulation	脉冲振幅调制叶绿素荧光
PAR	Photosynthetic Active Radiation	光合有效辐射
PC	Principal Component	主成分
PhiP	Quantum efficiency for PSII photochemistry	PSII 光化学量子效率
PSI	Photosystem I	光系统 I
PSII	Photosystem II	光系统 II
PSO	Particle Swarm Optimization	粒子群优化算法
RMSE	Root Mean Squared Error	均方根误差
R_{NIR}	Directional reflectance in the NIR region	近红外波段方向性反射率
R_{RED}	Directional reflectance in the red region	红光波段方向性反射率
RRMSE	Relative Root Mean Squared Error	相对均方根误差
RUE	Radiation Use Efficiency	光能利用率
R_{vis}	The broadband visible (VIS) directional reflectance	可见光反射率
SAA	Solar Azimuth Angle	太阳方位角
SCOPE	The Soil Canopy Observation, Photochemical and Energy fluxes model	土壤冠层观测、光化学和能量 通量一维辐射传输模型
SIF	Solar-Induced Chlorophyll Fluorescence	日光诱导叶绿素荧光
SIT	Spectral Invariant Theory	光谱不变理论
SVD	Singular Value Decomposition	奇异值分解
SZA	Solar Zenith Angle	太阳天顶角
TOC	Top of canopy	冠层顶部
USDA	United States Department of Agriculture	美国农业部
NASS	National Agricultural Statistics Service	美国农业部国家农业统计局
USDM	The U.S. Drought Monitor	美国干旱监测图
VAA	Viewing Azimuth Angle	观测方位角
V_{cmax}	The maximum carboxylation capacity	最大光合羧化能力
VPD	Vapor Pressure Deficit	饱和水汽压差
VZA	Viewing Zenith Angle	观测天顶角
WDRVI	Wide Dynamic Range Vegetation Index	宽动态范围植被指数

第一章 绪论

1.1 研究背景和意义

干旱灾害是一种主要的自然灾害会对区域农业生产、水资源和环境造成严重损害,尤其是在日益变暖、降水量减少的全球大背景下,这种自然灾害对世界粮食安全产生深远影响(Sternberg et al., 2011)。IPCC 第五次评估报告指出过去 130 年全球平均升温 0.85°C ,并且自 20 世纪 50 年代以来,世界上一些地区如南欧和西非等地出现了更严重和更长时间的干旱,其主要是由蒸散增加与降水减少导致(Stocker et al., 2013)。干旱对全球许多国家农业生产产生严重影响,美国主要的“面包篮”的大平原地区受到干旱影响较大,例如 1930 年代、1950 年代的极端干旱事件(Cook et al., 2007),2011 得克萨斯州干旱(Williams et al., 2015)以及 2012 年大平原中部干旱(Hoerling et al., 2014)等干旱事件频繁发生对美国造成超过数千亿美元的损失(Smith and Matthews, 2015)。中国的作物是受旱灾影响较为严重的国家(王春乙等, 2007),同时也是世界上最大的小麦生产国和消费国,由于 2010 年 11 月份开始的北方持续干旱威胁到冬小麦生产,政府采取一系列水分供应和进口谷物的措施来尽可能减少干旱灾害对粮食供应的影响(Yu, 2011)。华北平原作为中国主要的粮食生产“摇篮”,从 1970 年开始,为了粮食产量提高,过度开采地下水使得地下水位下降约 36m(pei et al., 2017),同时在气候变化影响下,降水减少和温度升高导致华北平原干旱灾害频繁发生,据报道在 1980-2011 年期间每年约有 740 万公顷的农田遭受干旱灾害影响(Wang et al., 2015)。在澳大利亚农业区同样受到干旱影响,主要经历了 1895-1903 干旱、1937-1945 干旱以及 1997-2009 的东南部农业区“大干旱”时期,对社会、经济及环境造成严重影响,干旱原因主要与温度上升使得地区土壤水分枯竭有关(Ummenhofer et al., 2009)。2010 年干旱导致俄罗斯和乌克兰的小麦减产 32.7%和 19.3%,严重影响了世界范围内的小麦供应,导致全球价格急剧上涨,区域干旱对粮食供应产生全球影响(Yu, 2011)。因此在各国粮食主产区中进行干旱监测和产量评估对社会经济发展和粮食安全至关重要。

对于农业生产作物产量定量化评价来说需要更加机理的过程模型来解释,尤其是准确评估干旱灾害对农作物产量的影响。农作物产量的估算一般采用作物模型来完成,作物模型考虑了气候相关因子、土壤相关性质以及管理措施等因素对农作物产量形成的影响(Wang et al., 2019)。但是,目前模型的主要问题是模拟结果存在较大的误差,并且没有考虑对极端灾害情况的模拟(Feng et al., 2019)。模型误差的来源主要是模型结构上的简化和由于观测数据的缺乏而导致模型参数不准确。由于作物模型本身是对作物生长过程的简化,无法模拟复杂胁迫环境对作物生长的影响。基于数据同化的

方法将多源遥感数据如 LAI、NDVI 等反应植被表观状态信息的植被指数与作物模型进行数据同化(Huang et al., 2019), 可以明显减少模型参数的不确定性以及改进对干旱灾害的响应能力, 从而提高模型对作物产量的预测精度。

日光诱导叶绿素荧光 (Solar-Induced Chlorophyll Fluorescence), 简称 SIF, 特指在太阳光照条件下, 叶片荧光的激发, SIF 是监测作物生长状况及估计作物产量的新方法。遥感卫星携带有各种观测仪器可以观测区域植被的光谱、冠层结构、叶面积等生长信息, 适用于区域农业干旱监测。基于遥感(卫星、无人机及近地面观测)的反射率数据可以计算一系列的植被指数产品如 NDVI、EVI 等可反映植被生长信息(Xue and Su, 2017), 但是传统遥感干旱监测方法存在许多问题: 如依靠反射率计算的 NDVI 等植被指数只能反映植被的“绿度”信息(Walker et al., 2012), 而对于植被内部生理情况却不能很好的反映(Sun et al., 2017), 因此当植被受到轻微干旱胁迫时, 此时植被的“颜色”信息没有发生改变, 因此传统植被指数响应的也不是很敏感, 只有当叶片“颜色”或者冠层结构发生明显变化的时候, 才能通过植被指数发现干旱, 而此时干旱已经对农作物造成了严重损害。相比于传统的表征“绿度”的植被指数, SIF 是探测植被光合作用的理想探针(Zhang et al., 2018), SIF 可以很好的反映作物光合生理过程信息, 对于农田干旱监测的敏感性优于传统植被指数, 可用于监测作物的生长状态并进行产量预测(Guanter et al., 2014)。通过遥感卫星的高光谱数据可以精确反演出植被叶绿素荧光信息, 进而可对全球植被光合生理状态进行监测(Sun et al., 2017)。然而受到冠层结构的影响, 遥感观测的 SIF 信息只能反映荧光整体信息的一部分并且不同空间尺度荧光与光合的耦合关系对环境胁迫响应不同(Lu et al., 2020; Magney et al., 2020), 目前缺乏胁迫条件下光合与荧光关系变化的机理解释, 如干旱胁迫对叶片荧光激发本身的影响以及植被冠层结构对 SIF 辐射传输的影响(Dechant et al., 2020; Magney et al., 2019)。因此需要综合生理实验、多尺度叶绿素荧光观测、作物模型模拟以及遥感观测数据来更有效地评估干旱对农作物叶绿素荧光释放、光合作用及最终产量形成的影响。

1.2 国内外研究进展

1.2.1 叶绿素荧光概况

太阳光能到达叶片表面被植物叶绿体光系统吸收后有三个能量消耗途径, 即光合作用(P), 植物自身的热耗散(NPQ)和叶绿素荧光(F)(Krause and Weis, 1991)。光系统水平的叶绿素荧光由光系统 I (PSI) 和光系统 II (PSII) 组成, PSI 的叶绿素荧光峰值在 730nm 左右, 而 PSII 的叶绿素荧光峰值在 685nm 左右(Porcar-Castell et al., 2014)。叶绿素荧光总光谱范围为 640-850 nm, 光谱呈双峰结构包含红光和近红外两个波峰, PSII 荧光峰值要高于 PSI 荧光峰值, 因此光系统荧光光谱整体呈现“左高右低”的形状。当可见光(400-700 nm)到达叶片后会发生反射、透射和吸收过程, 吸收的光有一部分会以

荧光(640-850 nm)的方式重新释放出来,由于荧光波段与可见光波段有所重叠,有一部分荧光在叶片内部传输中会被叶绿体的色素分子重新吸收,其中红色波段吸收较强,因此通常叶绿素含量较高时,叶片上下表面的荧光光谱双峰呈“左低右高”的形状(Porcar-Castell et al., 2014)。太阳光谱范围覆盖叶绿素荧光的全波段范围,并且荧光信号十分微弱,因此不能直接通过光谱仪观测得到,由于太阳光在到达地面之前部分波段会被大气分子吸收,因此会形成许多宽度为 0.1-10 nm 的暗线,称为夫琅和费暗线(Fraunhofer Line)(Kozyrev, 1956)。Fraunhofer Line 是荧光观测的“窗口”,主要是由于在暗线波段内植被的反射光较弱,而叶绿素荧光信号具有“井填充”效应,通过相关算法如 FLD(three bands FLD)、cFLD(correct FLD)、iFLD(improved FLD)、eFLD(extended FLD)以及 SFM(Spectral Fitting Model)等可以实现对植被 SIF 信号的反演和提取(章钊颖等, 2019)。反演算法的精度受到冠层参数、光谱分辨率、光谱信噪比的影响(胡姣婵等, 2015)。叶绿素荧光是植物做光合作用的同时向往发射出的能量,其消耗的能量一般只有光合作用耗能的 1-2%(Baker et al., 2008)。由于叶绿素荧光变化与植被内部光合生理过程密切相关,以及近年来的 SIF 研究的飞速发展(Mohammed et al., 2019), SIF 监测植被生理潜力及与光合的相关机制关系被逐渐挖掘出来。

叶绿素荧光研究手段主要有主动和被动荧光观测以及辐射传输模型模拟。主动荧光观测主要以脉冲振幅调制(Pulse-Amplitude-Modulation, PAM)叶绿素荧光为主,主动荧光观测是人为制造饱和脉冲光来刺激叶片产生荧光信号,而被动荧光就是指太阳或其他光源照射叶片后,叶片本身释放的一种稳态的荧光(Zarco-Tejada et al., 2003)。通过叶绿素荧光动力学相关参数可以研究植物光合作用潜力以及胁迫响应(张守仁, 1999), PAM 荧光大小的变化可反映叶片光合效率情况(Schreiber et al., 1986)。国内研究中主动叶绿素荧光观测相关的研究开展较早,主要是研究干旱胁迫、盐胁迫、水分胁迫以及低温胁迫对植物光合特性及生理的影响(关雅楠等, 2013; 魏国强等, 2004; 杨晓青等, 2004),而被动荧光观测起步较晚,主要以病害监测和 GPP 估算及干旱监测研究为主(陈思媛等, 2019; 刘青瑞等, 2017; 史晓亮等, 2020)。国外研究中开展更多的基于叶绿素荧光辐射传输机理的模型模拟研究,主要有叶片尺度荧光模拟、荧光在冠层辐射传输过程模拟以及生态系统模型与荧光耦合过程的模拟。尽管叶绿素荧光和 GPP 都是发生在光系统水平,但是叶绿素荧光本身是一种光学信号,从光系统到冠层顶辐射传输过程中必然会受到叶片生化参数以及冠层结构参数的再吸收和散射的影响,因此会削弱了叶绿素荧光对 GPP 的估算能力。为了更好的进行 GPP 估算以及叶绿素荧光与生态系统模型的耦合,需要对叶绿素荧光建模的多尺度传输过程进行充分研究。

1.2.2 叶绿素荧光建模过程研究进展

叶绿素荧光建模过程涉及光系统水平、叶片水平、冠层水平辐射传输过程。叶绿素

荧光最初是在光系统水平随着光合作用过程中发出的辐射信号，经过叶片和冠层的辐射传输过程，从而被仪器探测到。叶片吸收太阳能量后，在光系统水平产生的叶绿素荧光，然后在叶片内部被色素物质（如叶绿素、叶黄素、花青素等）再吸收、散射作用下，释放到叶片表面，经过冠层的散射和再吸收作用从而到达冠层顶。因此 SIF 机理建模过程可通过如下公式进行表示：

$$\text{SIF}_{canopy}(\lambda) = \underbrace{\text{PAR} \times \alpha \times \beta \times \Phi_F}_{\text{SIF}_{PS}} \times \underbrace{\varphi(\lambda)}_{\text{SIF}_{PS}(\lambda)} \times \underbrace{\varepsilon(\lambda) \times f_{esc}(\lambda)}_{\text{SIF}_{leaf}(\lambda)} \quad (1-1)$$

式中，变量的下角标 *PS*、*leaf* 和 *canopy* 分别表示光系统水平、叶片水平和冠层水平； λ 是波段；PAR 是光合有效辐射； α 是叶片吸收光能系数， β 是光能在 PSI 和 PSII 的分配比例，在光系统尺度叶片吸收系数（ α ）和光能在 PSI 和 PSII 的分配比例（ β ）通常设定为常数即 α 为 0.84， β 为 0.5； Φ_F 和 φ 分别是荧光激发效率和荧光激发谱，分别控制光系统水平荧光谱形大小和形状， Φ_F 包含 PSI 和 PSII 荧光激发效率，其中 PSII 荧光激发效率与光合作用存在密切联系； ε 是叶绿素荧光从光系统到叶片荧光转化系数，与叶片内部结构和色素浓度相关； f_{esc} 是叶绿素荧光从叶片到冠层的荧光逃逸概率，与冠层结构（叶倾角分布、叶面积指数、异质性程度）、太阳-观测几何角度、土壤反射率等密切相关。

1.2.2.1 光系统尺度荧光研究

光系统尺度荧光激发过程主要受到荧光激发效率和荧光激发谱的影响。目前有多个叶片荧光模型可以模拟叶绿素荧光在植物叶片中的辐射传输，例如 FluorMODleaf(Pedrós et al., 2010)、FLUSPECT(Vilfan et al., 2016)、改进的蒙特卡洛光线追踪模型(Zhao and Ni, 2018)和 FluLCVRT(Kallel, 2020)。这些叶片荧光模型的核心是光系统水平的荧光激发谱，而 PSI 和 PSII 的荧光激发谱最初是从稀薄的叶绿体溶液中测定得到，主要参考 Franck 等(2002)在室温下测的大麦叶片 PSII 荧光激发谱以及 Croce 等(1996)在 6°C 下测的玉米叶片 PSI 荧光激发谱（如图 1-1 显示 PSI 和 PSII 激发谱形状）。需要注意的是这些实验测得的荧光激发谱都是离体叶绿素溶液测量，不可避免的会损伤叶绿体的结构，光合作用失活，叶绿体溶液所测量荧光激发谱仅是叶绿体的光学属性光谱而不受到光合生理调节。

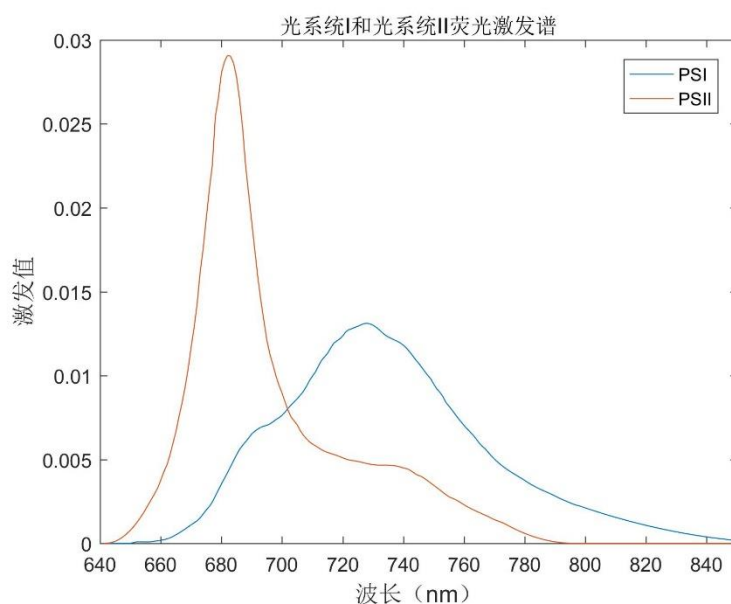


图 1-1 FLUSPECT 内置 PSI 和 PSII 荧光激发谱

Figure 1-1 FLUSPECT built-in fluorescence emission spectrum of PSI and PSII

为了获得活体叶片的荧光激发谱，Palombi 等(2011)提出了一种基于 Kautsky 效应的叶片 PSI 和 PSII 荧光发射光谱分离的方法。其基本原理是：经过暗适应的植物叶片在可见光照射的一瞬间，植物叶片会释放出一种暗红色的随时间变化的荧光信号，这种现象称为 Kautsky 效应，其中荧光开始变化的初始点为 O，随后荧光上升阶段分为 O-J, J-I, I-P 三个阶段荧光达到最高峰 P 点，这就是快速叶绿素荧光诱导动力学曲线过程，这个过程主要与 PSII 的原初光化学反应相关(Guisse et al., 1995; Krause and Weis, 1991)，PSI 的贡献在这个过程中通常认为是保持不变的(Dau, 1994; Pfündel, 1998)，尤其是在 O-I 阶段(Palombi et al., 2011)。因此通过 Kautsky 效应的光谱变化曲线就可以将叶片水平的 PSI 和 PSII 的荧光发射光谱分离出来，进而再通过叶片的荧光辐射传输模型可以反演出光系统水平的荧光激发谱。然而基于 Kautsky 效应分离得到的荧光发射光谱是瞬时荧光光谱，而不是在叶绿素荧光稳定状态得到的荧光发射光谱。有研究表明通过 FLUSPECT 模型可以在反演得到稳态叶绿素荧光光谱下的荧光激发谱，此方法获得的荧光激发谱是 PSII 和 PSI 综合的荧光激发谱(van der Tol et al., 2019)。光系统荧光激发谱是叶片荧光辐射传输模型的核心，通过光系统荧光激发谱的研究，有助于提高叶片荧光模型对全波段叶绿素荧光光谱模拟的准确性，进而改善光系统荧光建模的机理性。

1.2.2.2 叶片尺度荧光研究

叶片尺度荧光研究需要考虑叶片内部结构以及色素分子对荧光的吸收和散射对叶片表面荧光光谱形状的变化。由于叶片反射率和透射率的模拟可以很好的反演叶片内

的色素含量，并且叶绿素荧光在叶片内的传输过程与太阳光子没有什么本质不同，因此对叶片荧光的模拟通常建立在不同的叶片光学属性模型基础上（如图 1-2 显示）。目前应用最广泛的叶片光学模型是 PROSPECT 平板模型(Jacquemoud and Baret, 1990)，PROSPECT 是将叶片视为 N 层平板组成，其中最上层为单独一层太阳光入射光角度为 α ，其他 N-1 层假设入射光各向同性。模型输入参数分为叶片结构参数和叶片生化参数，PROSPECT-5B 模型(Feret et al., 2008)，在模型基础上调整了生化参数种类，包含了叶绿素、类胡萝卜素、棕色素、水分和干物质，可以准确模拟叶片 400-2500nm 波段的反射率和透射率。在 PROSPECT 基础上开发的 FluorMODleaf(Pedrós et al., 2010)和 FLUSPECT(Vilfan et al., 2016)荧光模型增加了荧光的激发矩阵模块，使得平板模型具有模拟叶绿素荧光发射的功能。FluorMODleaf 和 FLUSPECT 主要区别在于荧光量子产量的计算，FluorMODleaf 是将分子在发射叶绿素荧光之前停留在激发态的时间来计算荧光量子产量，而 FLUSPECT 模型直接将 PSI 和 PSII 的荧光量子产量作为输入参数。

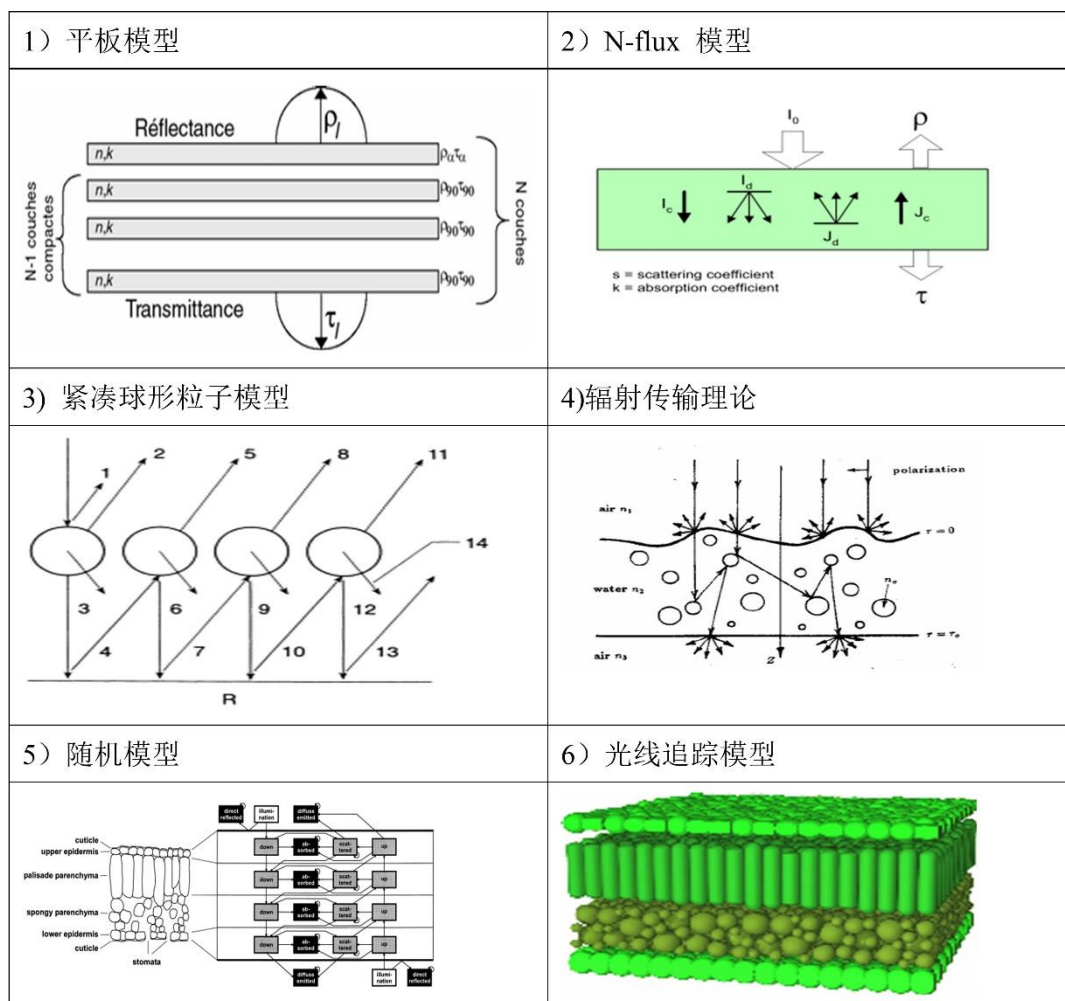


图 1-2 光学属性叶片模型

Figure 1-2 Optical properties leaf models

1.2.2.3 冠层尺度荧光研究

冠层尺度荧光研究主要基于光学理论和辐射传输模型模拟研究荧光在冠层的辐射传输过程。叶绿素荧光从叶片到冠层的辐射传输过程中大部分的荧光光子会在冠层内重新吸收和散射，因此只有一部分荧光光子可以“逃逸出来”，这一过程与冠层结构性质相关如叶倾角分布、叶面积指数、聚集度指数等(Yang and van der Tol, 2018)。能够逃逸出来的荧光是被仪器观测到的冠层顶荧光，而冠层所有叶片释放的荧光称之为冠层总荧光，通过冠层总荧光和冠层顶荧光可以估算得到冠层的荧光逃逸概率 (f_{esc})。 f_{esc} 的研究方法主要基于光谱不变理论以及一维和三维的荧光辐射传输模型模拟。光谱不变理论 (Spectral Invariant Theory, SIT) 认为冠层对光子的吸收和散射只取决于波长和不依赖波长的冠层结构参数 (再碰撞概率) (Knyazikhin et al., 2011)。再碰撞概率将光子辐射传递视为随机过程来描述：当光子与冠层中的元素相互作用时，其吸收或散射的概率随波长变化。但是，一旦光子被散射，它将再次与冠层碰撞的可能性仅取决于散射光的位置和散射方向。叶绿素荧光在冠层内的辐射传输过程与太阳光子的反射辐射过程相似，区别只是光子来源不同。反射光来源于冠层上方的太阳光，而荧光是由叶片内部叶绿素分子释放。基于光谱不变理论，当土壤背景为非反射表面 (“黑土”)，近红外 SIF 的 f_{esc} 可以由冠层的近红外反射率 (R_{NIR})，叶片反照率 w_L 以及冠层对入射光的截获 i 得到(Lu et al., 2020; Yang and van der Tol, 2018)，即 $f_{esc} = R_{NIR} / (i \times w_L)$ 。近红外 SIF 的散射/吸收过程可以很好地用 NIR 来表示，同样基于光谱不变性理论以及考虑到土壤背景的影响，Zeng 等(2019)表明，近红外区域的逃逸概率可估算为： $f_{esc} = NIR_v / f_{APAR}$ ，其中 NIR_v 通过 NIR 与 NDVI 计算得到， f_{APAR} 是冠层对光能有效辐射的吸收比例，这是一种简单准确估算逃逸概率的方法，在一定程度上考虑土壤背景的影响，并且很容易通过遥感数据进行应用。Yang 等(2020)通过荧光在冠层中辐射传输过程推导出 R_{NIR} 与可见光反射率 R_{vis} (400-700 nm) 的差，即荧光校正植被指数 FCVI，可用于校正近红外区域 SIF 的 PAR 的吸收和散射效应，更好地反映出冠层总荧光释放量，从而准确计算冠层荧光的逃逸概率。

f_{esc} 还可以通过荧光辐射传输模型进行模拟估算。一维荧光辐射传输模型 SCOPE (Soil Canopy Observation, Photochemical and Energy fluxes) 由 Van der Tol 等(2009)建立，其整合了 FLUSPECT 的叶片水平荧光模型，是目前应用最为广泛的荧光辐射传输模型 (奚雷 等, 2019)。SCOPE 不仅考虑辐射传输过程与能量平衡相结合，而且还具有模拟冠层光合作用的能力。SCOPE 模型主要由四个模块组成：RTMo 模块主要是计算太阳和天空辐射，模拟冠层的辐亮度，净辐射和光合有效辐射；RTMt 模块主要是通过能量平衡方程输出植被和土壤温度热辐射；能量平衡模型是以 RTMo 和 RTMt 模块的输出结果作为输入参数，模拟显热、潜热和土壤热通量，同时模拟叶片的光合作用和叶片表面温度；RTMf 模块是通过输入叶片 FLUSPECT 模型计算的激发矩阵以及冠层的光合有效辐射，模拟冠层内的荧光的释放和辐射传输过程。由于植被冠层叶片垂直分布的

差异会影响冠层内的辐射收支和荧光在冠层内的相互作用, Yang 等(2017)在 SCOPE 模型的基础上将叶片属性的垂直变化考虑进去, 构建了 mSCOPE 模型, 与传统 SCOPE 模型相比, 该模型提高了冠层顶部反射率和 SIF 模拟的准确性。目前 SCOPE 已经升级为 2.0 版本(Yang et al., 2021), 可以将卫星观测到的可见光、红外和热红外数据与陆面过程联系起来, 并量化了冠层的微气候, 其具有几点改进 a) 可以定义不同特性的叶层结构, 从而可以模拟植被下层的荧光传输过程, b) 具有模拟土壤反射率的功能, 从而更准确从冠层的观测反射率中剔除土壤背景的影响, c) 可以模拟有叶黄素循环引起的冠层反射率的变化, 从而对环境胁迫做出响应, d) 优化模型算法结构, 计算效率提高 90%。这些改进提高了模型对复杂场景的模拟能力, 探索了遥感信号对植被生理的响应, 同时运行效率的提高加强了从卫星等遥感数据中反演地面产品的可操作性。

由于一维荧光辐射传输模型由于假设冠层水平方向各向均一, 多适用于封垄后的农田和郁闭的草地这种简单场景的模拟。而对于“垄行”结构较为明显的农田(通常在作物生长早期)或者森林等较为复杂的场景, 冠层结构对 SIF 的辐射传输过程的影响不可忽略, 因此需要构建三维场景进行异质型场景模拟(Liu et al., 2019a; Zhao et al., 2015)。目前三维荧光辐射传输模型常见算法是光线追踪算法, 该算法模拟光子被冠层组分所截获, 从而产生反射、透射以及吸收的过程, 主要优势在于适应不同复杂程度的场景模拟(Gastellu-Etchegorry et al., 2018)。常见的三维荧光辐射传输模型有 FluorWPS(Zhao et al., 2016), FluorFLIGHT(Hernández-Clemente et al., 2017), DART(Gastellu-Etchegorry et al., 2018), 其基本原理及场景设置见表 1-1。

表 1-1 三维荧光辐射传输模型

Table 1-1: 3D fluorescence radiation transfer models

模型	原理	荧光模块	场景形式	参考文献
DART-SIF	下行光线追踪	FLUSPECT	体元模型	(Gastellu-Etchegorry et al., 2018)
FLiES-SIF	下行光线追踪	FLUSPECT	简化几何体	(Sakai et al., 2020)
FluorWPS	下行光线追踪+ 光子扩散	FLUSPECT	面片坐标	(Zhao et al., 2016)
FluorFLIGHT	下行光线追踪	FLUSPECT	简化几何体	(Hernández-Clemente et al., 2017)
FluLCVRT	下行光线追踪	FluorModleaf	真实 3D 叶模型	(Kallel, 2020)

利用三维辐射传输模型可以定量分析光子在植被冠层中的传输过程(Disney et al., 2006), 目前的三维荧光辐射传输模型都是基于下行光线追踪来仿真模拟光子传输到叶

片上, 计算由叶片发射出的荧光光子通过冠层的辐射传输过程到达传感器的能量。例如 DART-SIF 模型中, 荧光光线通过离散坐标方向进行传播, 并在场景顶部被搜集, 同时可以模拟多个角度反射率、能量收支、光合有效辐射等多种遥感数据产品(Gastellu-Etchegorry et al., 2017)。FLiES-SIF 模型(Sakai et al., 2020)采用了空间明确的森林景观基于蒙特卡洛光线追踪方法, 光子的路径长度和散射方向由随机数和概率分布函数(例如 Lambert-Beer 指数函数和散射相位函数)确定, 必须考虑散射和重新吸收发出的荧光, 以识别叶绿体发出的荧光与冠层顶部发出的荧光辐射之间的关系(Porcar-Castell et al., 2014)。FluorWPS 荧光模型(Zhao et al., 2016)通过加权光子扩散方法, 采用物理意义上的蒙特卡洛光线追踪技术模拟了荧光散射和吸收的辐射过程, 该模型的应用不限于一个特定的树冠, 可以独立于辐射传输过程描述场景, 树冠顶部跟踪来自光源(直射阳光和漫射的天光)的光子, 并累积光子与冠层元素相互作用的贡献, 在模型中采用了“光子分裂”和“减重”方法, 以实现光子跟踪的多光谱仿真模拟, 追踪过程中, 采用“俄罗斯轮盘赌”方法终止光子的跟踪, 提高运行效率。FluorFLIGHT 同样通过耦合叶片荧光模型 FLUSPECT 和 3-D 光线追踪模型 FLIGHT 来解释冠层异质性, 它是专门为评估异质林冠层图像上的荧光信号的敏感性而开发的(Hernández-Clemente et al., 2017)。FluLCVRT(Kallel, 2020)运用矢量辐射转移理论来模拟偏振光的散射和荧光发射, 使用蒙特卡洛射线追踪技术对真实 3-D 叶子结构模型进行仿真模拟。通过三维场景的设置以及冠层辐射传输过程的模拟, 可以更加真实的反映冠层结构对 SIF 的辐射传输影响, 从而更准确的估算冠层荧光逃逸概率。

1.2.2.4 区域尺度荧光研究

区域尺度叶绿素荧光研究主要以遥感 SIF 产品数据同化以及荧光模型与生态系统模型耦合研究为主。目前遥感 SIF 产品主要有 TROPOMI, OCO-2, GOME-2, GOSAT, TanSat 等(Mohammed et al., 2019), 值得注意的是这些 SIF 产品卫星设计目的是进行大气组分及环境的监测, 由于这些卫星的光谱分辨率较高, 且具有荧光观测“窗口”波段信息, 因而可通过相关算法得到衍生产品 SIF, 由于 SIF 可直接反映的植被光能利用率、光合生理过程及光合生产力的变化(Lee et al., 2013; Song et al., 2018; 程占慧 和 刘良云, 2010), 遥感 SIF 的研究越来越广泛。卫星观测的 SIF 提供陆地光合作用或总初级生产力(GPP)有用信息, 而生态系统模型中的碳水过程及能量循环模拟存在极大不确定性(Hartley et al., 2017), 通过将遥感观测的 SIF 信息融合到生态系统模型中, 可以约束光合作用的模拟, 从而提高生态系统模型 GPP 的模拟(Lee et al., 2015)。目前, 有很多陆面过程模型如 CLM4(Lee et al., 2015)、BETHY(Norton et al., 2018)、ORCHIDEE(Bacour et al., 2016)、BEPS(Qiu et al., 2019)模型已经成功将 SIF 耦合进去, 极大提高了陆面过程对碳通量预测的潜力。Lee 等(2015)基于荧光量子产量与光合量子产量关系(Van der Tol et al., 2014)将 SIF 与陆面模拟模型 NCAR CLM4 (National Center for Atmospheric

Research Community Land Model version 4) (Lawrence et al., 2011)光合作用进行耦合, SIF 模拟结果与 GOSAT 的 SIF 遥感观测结果进行比较, 一致性较好。Norton 等(2018)将 SCOPE 模型与 BETHY (Biosphere Energy Transfer Hydrology) 模型(Knorr, 2000)耦合, 建立遥感荧光与模型的同化系统, 显著降低 BETHY 模型中对 GPP 估算的不确定性。Qiu 等(2019)和 Cui 等(2020)是将 SIF 与陆地生物圈模型 BEPS(Boreal Ecosystem Productivity Simulator)(Chen et al., 1999)进行了集成, 前者构建了适用于不同植被冠层结构的阳叶(光照叶片)和阴叶(阴影部分叶片)的荧光模拟, 并验证了叶片和冠层尺度的 GPP 与 SIF 关系, 后者是将 BEPS 与 SCOPE 的荧光冠层辐射传输过程耦合在一起, 并在多个站点和全球范围对模型性能进行验证。目前基于 SIF 与生态系统的耦合对生态系统模拟碳循环精度有了较大的提高。

1.2.3 叶绿素荧光与光合关系研究

日光诱导叶绿素荧光(SIF)是近几年来快速发展的遥感技术, 由于其与植被光合作用直接相关, 因此被用作探测植被生理变化和环境胁迫影响的强大、无损和可靠的工具(Frankenberget al., 2011; Guanter et al., 2014; Porcar-Castell et al., 2014)。植物叶绿素吸收的光合有效辐射(APAR)主要有四种耗散途径, 分别是为光合作用提供能量的光化学量子产量(Φ_P), 激发叶绿素荧光的荧光量子产量(Φ_F)以及用于热量耗散的非光化学淬灭(NPQ)能量包含调节性热耗散(Φ_N)和本构热耗散(Φ_D)。这四种能量之间由于植被生理响应过程的不同存在竞争关系, 但其能量之和始终为1。光系统II(PSII)中由叶绿素a发出的荧光强度取决于光反应中激发电子的数量, 与光合速率和NPQ的功能状态有关。因此, SIF、光合与NPQ之间的生理联系已经被广泛研究。尽管在遥感上观测到冠层SIF与光合存在显著的线性或非线性关系(Li et al., 2018; Liu et al., 2022a), 但是在不同环境胁迫(光照、温度、水分)下SIF与光合的关系存在相当大的不确定性(Marrset al., 2020; Martini et al., 2022; Wohlfahrt et al., 2018)。SIF主要在光反应过程激发, 而光合CO₂同化过程主要是在暗反应中进行, 由于光合作用中的光反应和暗反应之间在环境胁迫下可能存在不同程度的解耦(Gu et al., 2019), 在这些环境因素中, 水分限制和高温是影响植被生产力降低的关键因素, 干旱胁迫下SIF和光合之间的关系仍然很复杂。

正确理解多尺度及胁迫环境下叶绿素荧光与光合的关系对SIF与光合建模至关重要。在叶片尺度上, Van der Tol等(2014)通过分析不同光照、CO₂、温度、氮肥处理和干旱条件下不同物种叶片PAM测量的叶绿素荧光和气体交换数据, 发现 Φ_P 和 Φ_F 之间存在明显的非线性关系, 并对其关系进行了量化。在冠层尺度上, Gu等(2019)基于光能利用率原理, 将冠层认为是“大叶”, 推导了冠层SIF和总初级生产力(GPP)之间的机理关系, 并构建了一个以实际电子传递速率为纽带连接SIF和GPP的机理光响应模

型。叶绿素荧光和光合实际观测研究显示, 在叶片上荧光和光化学产量之间响应是由 NPQ 调节的, 在低光强下, 随着 Φ_P 的降低, Φ_F 会继续增加, 然而在某个拐点, 随着 Φ_P 的降低, Φ_F 也会下降, 在高光和高胁迫条件 (高 NPQ) 下, 当 Φ_P 降低到~0.3 以下时, Φ_F 会增加(Van der Tol et al., 2014); 在冠层尺度上, 通常将 SIF 与 GPP 消除 PAR 和冠层结构的影响, 将各种荧光与光合相关指标在环境胁迫条件下进行对比, 发现在胁迫环境下去除冠层结构和 PAR 影响的 SIF 比直接观测的 SIF 对胁迫响应更敏感(Chen et al., 2021; Kimm et al., 2021)。

叶绿素荧光与光合作用在不同时空尺度及环境胁迫下存在复杂的关系。在大的时间和区域尺度上叶绿素荧光与光合的线性关系较强, 然而随着尺度降低及环境胁迫的因素两者的非线性关系明显。通常在遥感尺度中发现 SIF 与 GPP 之间有较强的线性关系(Sun et al., 2018; Verma et al., 2017; Yang et al., 2015)。Marrs 等(2020)认为区域尺度上的 SIF-GPP 的线性关系取决于空间、时间或观测角度上混合效应的综合影响。Magney 等(2020)卫星测量在时空分辨率上往往过于粗糙, 无法用 SIF 反映叶片内部真实光合生理过程, 并且叶片激发出的总体荧光在冠层传输过程的重吸收和散射效应会弱化冠层顶观测的 SIF 所涵盖的植物生理信息。还有大田观测研究表明作物 SIF-GPP 呈现线性关系主要是冠层结构性质导致(Dechant et al., 2020)。在叶片尺度上, 很多研究发现 SIF 与 GPP 之间存在明显的非线性关系, 如在强光条件下光合速率达到饱和而叶绿素荧光可以继续增加(Magney et al., 2017)。Marrs 等(2020)发现当植被叶片气孔关闭时, 光合速率迅速下降, 然而 SIF 下降不明显, SIF 不能很好的追踪光合的变化, 从而出现荧光和光合解耦现象。Helm 等(2020)通过干旱胁迫的实验研究表示在较短的干旱持续时间内, 叶片光合作用降低程度要远大于 SIF 的降低程度, 两者变化响应程度不同的。奚雷等(2019)研究不同生育期内水稻发育阶段 SIF 与 GPP 的相关性, 发现在成熟期时两者关系较好, 而在抽穗-开花期时 SIF 与 GPP 关系较差。

多波段荧光波段结合有助于提高光合估算能力。近年来, 对叶绿素荧光光谱与植被生理关系的研究越来越多, 这主要是由于相比单波段叶绿素荧光, 多波段甚至全波段荧光涵盖有更多生理与胁迫信息, 如荧光的红光 (~685 nm) 和远红光波段 (~750 nm) 的比值主要受到叶绿素浓度调控, 可以提供有关植被对水、温度或氮胁迫响应的信息 (Ač et al., 2015; Agati, 1998; Buschmann, 2007)。通过 SCOPE 模型模拟以及实际光谱观测结果证明多波段荧光组合相比单波段荧光与光合速率关系更为紧密(Liu et al., 2019b; Verrelst et al., 2016)。通过对叶片全波段荧光光谱的分解与解析以及生长季长期观测发现, 叶绿素荧光的全波段光谱变化可以提供有关非光化学淬灭(NPQ)等过程的新信息 (Magney et al., 2019; Zhang et al., 2019)。

SIF 对于光合参数估算和胁迫响应相比反射率指数更有优势。传统植被指数如 NDVI 及 EVI 已经被广泛应用于植被生产力监测研究, 然而这些指数仅仅可以反映植

被生长过程的静态信息（“绿度”），而不能反映植被的光合生理信息，更不能对干旱胁迫做出及时的响应。因此基于“绿度”信息的传统植被指数对作物产量的估计会有所偏差。许多研究证明 SIF 对植被生产力的估算能力相比传统植被指数效率会有所提高，如 Zhang 等(2014)利用 GOME-2 SIF 计算的最大羧化速率（ V_{cmax} ）并结合 SCOPE 模型模拟作物 GPP，发现基于 SIF 的 V_{cmax} 提高了 GPP 估算精度。Guanter 等(2014)证明基于遥感 SIF 可以更加准确的评估农业生产水平。Guan 等(2016)基于光合-荧光中的化学计量关系、光合碳代谢途径和呼吸损失等机制，利用 GOME-2 SIF 数据对作物产量的进行预测，研究结果表明 SIF 可反映环境胁迫对作物光能利用效率的影响，然而在将作物产量转化为生物量中所需的收获指数设定为固定值，忽略了作物生长发育中生物量向产量转变的过程以及环境因素的影响。Chen 等(2019)研究华北平原玉米生长季 SIF 的结果表明，SIF 对干旱胁迫比植被指数更敏感，对区域作物干旱监测更为可靠。此外，有研究表明 SIF 可大面积快速监测作物受病害胁迫的影响(赵叶等, 2019)。刘良云等(2012)研究表明在强光和高温环境胁迫下 C3 和 C4 作物的叶绿素荧光及热耗散变化特征有较大的差异，可通过遥感高光谱遥感数据提取作物的 SIF 与 PRI 指数，从而对 C3 和 C4 作物分类。与传统基于植被指数的作物产量监测方法相比，基于遥感 SIF 对农作物生长状态监测，可以从作物光合生理层面反映作物所受环境胁迫的大小，能够更加精准的预测作物产量。

SIF 对于光合估算受到冠层结构因素和观测方向的影响。遥感卫星、近地面无人机和地面塔基观测的冠层顶部（TOC）SIF 只是植被冠层总发射 SIF 的一部分，SIF 在冠层的辐射传输过程受冠层结构、土壤背景和太阳-传感器观测几何的影响，这些因素削弱了 SIF 和冠层总光合生产力（GPP）之间的关系。因此，植被的总 SIF 释放量（冠层内所有叶片的 SIF 释放量）与 GPP 的关系比 TOC SIF 更密切(Lu et al., 2020; Zhang et al., 2019)。近红外波段 f_{esc} 主要受冠层散射作用的影响，而红光波段的 f_{esc} 同时还与叶片内的重吸收有关(van der Tol et al., 2019)。即使在同一物种间 f_{esc} 也存在明显的差异，例如会受到作物不同种植结构以及生长期的影响(Chang et al., 2021; Dechant et al., 2020)。不同观测方向的 SIF 与冠层光合关系也不同，通过将冠层顶观测方向荧光转为最低点方向、热点方向以及半球方向均有助于提高 SIF 与 GPP 的相关性(Hao et al., 2021a; Hao et al., 2021b; Hao et al., 2022; Zhang et al., 2022)。量化 f_{esc} 需要太阳-观测几何、冠层结构参数、叶片的光学特性以及土壤背景四种类型的信息(Yang and van der Tol, 2018)。 f_{esc} 的量化对冠层总 SIF 的反演和 GPP-SIF 的建模十分重要(Liu et al., 2022b; Lu et al., 2020)。目前，很少有研究考虑 f_{esc} 与农田种植结构的关系，在之前研究中 f_{esc} 在农田中被视为常数(Guan et al., 2016; Guanter et al., 2014)或通过先验假设的物理模型进行计算(Romero et al., 2018; Romero et al., 2020)。由于农田会受到人为管理其作物种植株距和行距均会影响农田冠层的均一性，并且作物不同生长时期土壤背景的影响也不同，因此使得 f_{esc}

估算在农田中变得复杂。

1.2.4 作物模型 (APSIM) 光合模拟与约束

作物模型可以定量评估气候和土壤养分、水分以及不同种植管理措施对多种农作物生长动态和产量的影响。本研究拟采用的 APSIM(Agricultural Production Systems sIMulator)模型有接近 30 年的发展历史, 在全球有比较广泛的应用(Wang et al., 2019)。APSIM 是由澳大利亚联邦科工组织 (CSIRO) 和昆士兰州初级产业部等单位联合资助的农业生产系统研究组合作开发, 能够模拟土壤、作物、气象等各组分的相互作用的机理模型。该模型与荷兰的 WOFOST 和美国的 DSSAT 一起, 是世界三大作物模型之一, 可以模拟作物从播种开始到成熟过程中每日的生物量积累和分配、LAI 以及根茎叶和籽粒各个部分的生长(Holzworth et al., 2014)。目前可以用于小麦、玉米等 20 余种作物的模拟。APSIM 一大特点是通过中心模拟引擎调用气象、土壤、作物、管理等独立模块来实现模拟功能, 各个独立模块只要符合开发规则, 可以用 C#、VB 等编程语言编写。这种灵活的结构有利于吸引不同领域, 不同背景的专家对 APSIM 做出贡献。

APSIM 假定农作物每天新增生物量和光能利用率(Radiation Use Efficiency, RUE)有直接关系。RUE 虽然具有简单、计算高效的优点, 但是 RUE 是一个高度集成而且经验性过强的参数, 这不利于细致区分和定量刻画叶片光合生理对农作物生长和产量的影响。例如, 植物光合产物形成与叶片电子传递链速率、CO₂ 羧化速率以及气孔导度密切相关, 冠层不同叶片还会受到不同光照强度的影响。一个笼统的 RUE 其实不适用于更加精细地反映与光合作用密切相关的诸多因素的作用, 由于叶绿素荧光是与植物光合过程关系明显, 所以基于 RUE 概念的作物模型不适用于进行叶绿素荧光进行耦合。APSIM 模型的最新进展中已经加入冠层光合作用-气孔导度模块 (DCaPST), 形成叶片到大田的跨尺度光合模型(Wu et al., 2019)。DCaPST 开发主要涉及 (1) 相关作物属性的作物模型成分, 如叶面积指数和特定叶片氮含量和用于蒸腾供应的土壤水分吸收程度, 以及 (2) 确定潜力的叶片和冠层光合作用、冠层生物量的增加和蒸腾需求。这些成分与主要环境之间的动态相互作用可以模拟整个作物生命周期中的作物光合过程变化及产量形成过程。

许多研究者目前通过构建遥感与作物模型数据同化系统用于约束作物模型, 从而降低模型参数的不确定性。例如, Huang 等(2016)使用卡尔曼滤波算法将遥感叶面积指数 (LAI) 时间序列数据与 WOFOST 作物模型同化, 从而提高对区域小麦产量空间变化趋势模拟能力。然而有研究表明 MODIS LAI 产品在森林地区表现较好, 而在农田地区表现较差, 会低估农作物 LAI(付立哲等, 2017; 杨飞等, 2010)。同时遥感指数只能检测“绿度”, 而不能检测植被的实际光合活动, 因此使用它们会导致在环境胁迫响应方面存在一定的滞后(Lee et al., 2013; Lu et al., 2018)。研究已经证明, 遥感 SIF 是反映陆

地植被光合状态和相关胁迫程度有潜力的指标(Mohammed et al., 2019)。将 SIF 观测结果与作物模型相结合, 有助于降低作物生长模型光合模拟的不确定性, 以在更短的时间尺度上更好地跟踪作物状态和生长以及准确预测作物产量。然而作物模型并没有叶绿素荧光模拟能力, 因此遥感 SIF 与作物模型数据同化系统的构建首先需要基于荧光与光合生理关系, 把 SIF 模块耦合到作物模型中使之具备 SIF 模拟能力, 进而可以通过遥感 SIF 约束作物模型的光合模拟过程, 从而提高胁迫条件下作物产量模拟能力。

1.2.5 荧光与光合耦合方法研究进展

目前 SIF 建模基本方法是遵循 Lee 等(2015)和 Van der Tol 等(2014)描述的通用方法进行叶片水平总荧光建模, 即通过冠层吸收的光合有效辐射能量 (APAR) 与荧光量子产量的乘积, 类似于光能利用率模型。荧光量子产量可以通过 NPQ 模型和光化学量子产量得到, 光化学量子产量与植被的光合速率密切相关, 因此通过荧光量子产量和光化学量子产量, 从而建立光合-荧光耦合系统, 将 SIF 激发过程耦合到生态系统模型中。通过此方法建立的光合耦合模型, 极度依赖 NPQ 参数建模以考虑环境胁迫因素的影响 (Bacour et al., 2019; De Cannière et al., 2021)。Parazoo 等(2020)通过一系列陆地生物圈模型与 SIF 耦合研究发现该方法模拟的 SIF 对光响应存在较大差异, 模型模拟的 SIF 对 APAR 响应过于敏感。因此需要通过改善光合-荧光耦合方法, 以减少 SIF 对 APAR 响应的敏感程度, 从而提高 SIF 对光合的有效约束能力。

SIF 是在光合作用光反应过程中发射出来的光子信号。Gu 等(2019)建立了光系统 II 发射的总荧光 (SIF_{PSII}) 与光系统 II (PSII) 到光系统 I (PSI) 的实际电子传输速率 (J_e) 之间的理论方程 (MLR)。而 J_e 与实际光合速率之间的关系由 C3 和 C4 植物的电子转化效率来确定 (Farquhar et al., 1980; Von Caemmerer, 2000), 因此, 如果模拟得到光合速率, 通过电子转化效率, 就可以计算 J_e , 进而可以根据 MLR 方程获得 SIF_{PSII} , 由此基于 MLR 方程可以构建一个新的荧光-光合耦合系统。MLR 方程目前已用叶片净光合速率以及光合能力参数的直接估算, 并取得了不错的效果 (Han et al., 2021; Han et al., 2022)。同时, MLR 方程也可应用于冠层荧光的模拟用于揭示 SIF 日变化的生理和冠层结构因素 (Chang et al., 2021)。MLR 方程与 Van der Tol 等(2014)建立的荧光与光合耦合方程有相同的参数, 如最大光化学量子产量 ($\Phi_{PSII_{max}}$), 荧光速率常数和结构性热耗散速率常数, 不同的是 Van der Tol 等(2014)方程重点在于 Φ_F 的计算, 需要热耗散 (即 NPQ) 参数, 而 MLR 方程主要在于 J_e 计算, 需要 NPQ 或 PSII 反应中心开放比例参数 (q_L) (Gu et al., 2019)。与 q_L 相比 (主要受到光强控制), NPQ 复杂的激活和调节、延迟的时间反应以及多个时间尺度的动力学过程极大地增加了 NPQ 建模的复杂性 (Han et al., 2022)。基于 q_L 参数进行建模, 有助于简化 MLR 方程, 从而提高模型的应用潜力。

1.3 研究中存在的问题

植被叶绿素荧光是直接进行区域植被光合作用探测的新型光学指标，自 2011 年全球卫星 SIF 产品出现后，极大促进了叶绿素荧光遥感应用的发展。叶绿素荧光遥感在估算陆地生态系统 GPP、改进全球碳循环模拟、植被胁迫监测方面发挥着重要作用。但是由于 SIF 涉及到光系统、叶片、冠层以及区域尺度复杂的辐射传输过程影响，在多尺度研究中仍然存在一些问题需要进一步探索：

(1) 在光系统尺度，荧光激发谱对叶绿素荧光建模至关重要，然而基于原始的 PSI 和 PSII 荧光激发谱的 FLUSPECT 模拟的叶绿素荧光光谱形与叶片实际测量的荧光光谱以及波段位置存在系统性明显差异(Magney et al., 2017; Vilfan et al., 2016)。为了使观测的荧光光谱和 FLUSPECT 模拟的荧光光谱保持一致，van der Tol 等(2019)通过将 PSI 和 PSII 荧光激发谱合并，重新校准了模型内部的荧光激发谱，经过校准的光谱显然比原始激发谱更符合观测结果。但是仅用单一物种在特定环境条件下的叶片观测数据进行荧光激发谱的校准，仍然无法解决荧光激发谱在不同植被类型或者环境条件荧光激发谱是否适用的问题。

(2) 在叶片尺度，胁迫条件下叶绿素荧光与光合作用之间的响应机理不清晰。尽管遥感尺度上 GPP 和 SIF 相关性明显，但是在胁迫条件下，许多冠层观测结果显示 SIF 对 GPP 的估算能力有所下降，随着尺度降低及环境胁迫的影响，两者的非线性关系明显，如何通过相关生理参数约束，提高胁迫环境下荧光与光合的线性关系？

(3) 在冠层尺度，如何机理化将冠层总荧光转换为特定波段的冠层顶荧光，而不是通过经验性校正因子(Lee et al., 2015; Qiu et al., 2019)。这个高度聚合的校正因子没有明确考虑从宽波段到窄带 SIF 的转换过程，也忽略了 SIF 对观测方向的强烈依赖性(Liu et al., 2016)。因此，目前荧光与光合耦合方式可能存在机理上的局限性。同时荧光逃逸概率在农田场景中研究还不充分，由于农田受到人为管理的影响其“垄行”种植结构使得农田局部异质性增加，作物种植的行距和株距以及土壤反射率如何影响冠层荧光逃逸概率？

(4) 在区域尺度，基于生态系统模型与 SIF 耦合模型模拟的荧光受到 APAR 的显著影响，而荧光量子产率随光强变化不明显，这说明冠层结构因素是导致模型模拟荧光变化的主要原因，而对于作物模型来说，光合过程模拟更为准确，而冠层结构（如叶倾角）的变化考虑的并不充分，因此如何改进作物模型与 SIF 耦合过程使得模拟 SIF 对光合生理因素的响应更加敏感，这有助于遥感 SIF 更加有效约束作物模型光合模拟过程，改善对区域作物产量模拟能力。

1.4 研究目标

(1) 在光系统尺度, 研究不同环境条件下荧光激发谱的变化规律, 通过更准确的荧光建模方法, 提高叶片观测光谱与模拟光谱的一致性。

(2) 在叶片尺度, 探究胁迫环境下荧光与光合作用之间的响应机理, 通过建立相关生理参数约束模型, 提高荧光与光合的线性关系。

(3) 在冠层尺度, 研究将冠层总荧光转换为特定波段的冠层顶荧光的机理方法, 考虑荧光逃逸概率及其与农田场景中植被结构的关系, 以建立更加准确的叶片到冠层荧光模拟方法。

(4) 在区域尺度, 改进作物模型与 SIF 耦合过程, 提高作物模型光合模拟过程对 SIF 的响应敏感度, 从而提升作物模型对区域作物产量模拟能力。

1.5 研究内容

(1) 光系统荧光激发谱重构与 PSI 和 PSII 荧光激发效率分离

利用叶片反射和透射率光谱, 通过 FLUSPECT 模型反演得到叶片生化参数, 将叶片生化参数输入到 FLUSPECT 模型中, 用不同环境条件下的上行与下行叶绿素荧光光谱去反演荧光激发谱和荧光总激发效率参数。采用奇异值分解 (SVD) 方法进行荧光激发谱进行分解, 选择贡献率较大的主成分光谱, 建立样本权重与光合生理因子的经验关系, 从而进行荧光激发谱重构。基于 PAM 测量的 PSII 荧光量子产率和荧光总激发效率, 分离得到 PSII 和 PSI 荧光激发效率。通过 FLUSPECT 模型反演, 重构光系统荧光激发谱以提高叶片荧光模型在环境变化下对荧光光谱的模拟能力。

(2) 叶片荧光与光合干旱胁迫响应机理研究

采用室内干旱模拟实验, 以玉米作物作为研究对象, 通过光合-荧光-热耗散同步测量系统, 开展作物叶片的主动与被动叶绿素荧光和气体交换参数和 PAM 参数的同步测量实验。研究叶片光合与荧光相关生理变量在干旱胁迫下响应曲线, 分析叶绿素荧光与光合在干旱胁迫环境下关系变化的原因。基于叶片生理实验, 揭示干旱胁迫下叶绿素荧光与光合解耦机制并改进干旱胁迫条件下荧光估算光合的能力。

(3) 荧光逃逸概率估算以及农田冠层荧光逃逸概率影响因素研究

通过一维荧光模型 (SCOPE) 及三维荧光辐射传输模型 (DART) 进行荧光模拟。研究作物生长期不同观测角度对荧光逃逸概率的影响, 分析不同方向荧光逃逸概率的敏感参数。研究农田不同株行距种植模式及土壤背景对冠层荧光辐射传输的影响。通过模型仿真模拟以及理论方法进行荧光逃逸概率估算研究。通过冠层荧光辐射传输模型模拟, 理清荧光观测方向以及农田不同株行距种植模式对荧光逃逸概率影响的主导因素。

(4) 作物模型与叶绿素荧光耦合系统构建、改进及区域模拟

本论文的关键环节是进行作物模型与叶绿素荧光的耦合系统的构建、验证及改进。本研究以作物模型 APSIM 为载体,结合叶片生理实验结果进行参数校准,将 FLUSPECT 荧光模型与作物模型耦合,构建 APSIM-SIF 模型,实现作物模型模拟 SIF 的能力。利用农田冠层观测的 SIF 和 GPP 数据以及区域遥感 SIF 数据,验证 APSIM-SIF 模型模拟效果。由于传统 SIF 建模过程是以健康植被为基础进行构建的,在干旱胁迫下荧光响应程度偏低,本研究基于叶绿素荧光与光合干旱胁迫生理机制及冠层荧光的辐射传输过程改进传统 SIF 建模过程,改善其对干旱胁迫响应的敏感程度,并比较传统与改进后荧光建模方法对干旱胁迫响应敏感性以及对区域作物产量的模拟效果。

1.6 技术路线

本研究的核心是以 APSIM-SIF 模型为主,从光系统尺度、叶片尺度、冠层尺度、区域尺度进行叶绿素荧光与光合耦合与模拟研究。在光系统尺度,首先利用 FLUSPECT 模型反演叶片全波段荧光光谱确定光系统荧光模块相关参数,如光系统的荧光激发谱、荧光激发效率等参数,通过校准荧光激发谱和激发效率参数使得 FLUSPECT 模型模拟叶片荧光与叶片观测荧光保持一致。在叶片尺度,通过干旱生理实验确定胁迫条件下叶片光合速率与叶绿素荧光的响应关系,进行光合与叶绿素荧光机理建模。在冠层尺度,通过一维荧光辐射传输模型(SCOPE)和三维荧光辐射传输模型(DART)模拟冠层荧光逃逸概率,研究冠层荧光逃逸概率受到不同农田场景、土壤反射率及观测方向的影响,确定主导因素,并进行荧光逃逸概率估算;结合光合-荧光耦合方法和荧光逃逸概率估算,构建并改进 APSIM-SIF 模型,使用农田冠层观测 SIF 和 GPP 数据校准并验证 APSIM-SIF 模型对冠层荧光、光合模拟效果。最后在区域尺度上应用 APSIM-SIF 模型进行区域 SIF 模拟,用遥感 SIF 进行验证,同时利用优化算法,将遥感 SIF 数据和 APSIM-SIF 模拟荧光进行融合,从而对区域作物产量进行模拟,并通过区域统计产量进行模型评估。本研究技术路线如图 1-3 显示。

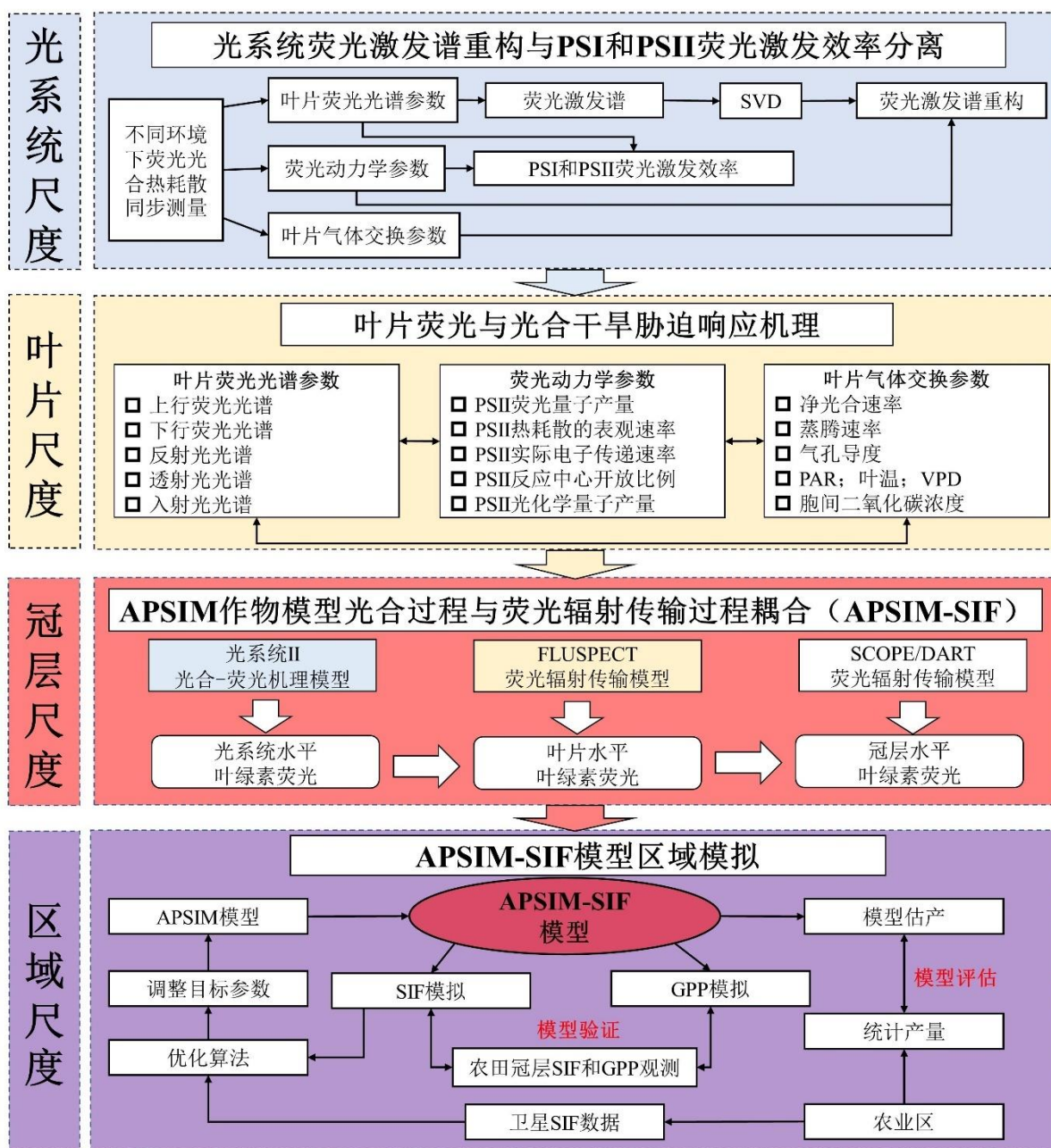


图 1-3 技术路线

Figure 1-3 Technical route

第二章 材料与方法

2.1 研究区域及数据来源

2.1.1 研究区域

研究区域（图 2-1）包括美国中西部的 12 个州：北达科他州（North Dakota）、南达科他州（South Dakota）、内布拉斯加州（Nebraska）、堪萨斯州（Kansas）、明尼苏达州（Minnesota）、爱荷华州（Iowa）、密苏里州（Missouri）、威斯康星州（Wisconsin）、伊利诺伊州（Illinois）、密歇根州（Michigan）、印第安纳州（Indiana）和俄亥俄州（Ohio）。本研究使用 APSIM-SIF 模型模拟了该地区的两种主要作物（玉米 *Zea mays* L. 和大豆 *Glycine max* (L.) Merr.）。2018 年中西部地区的玉米种植面积为 29522461 公顷，而大豆种植面积为 25439093 公顷。该研究区域是世界上农业生产最为集中的地区之一，约占全球玉米和大豆产量的 33% 和 34%。

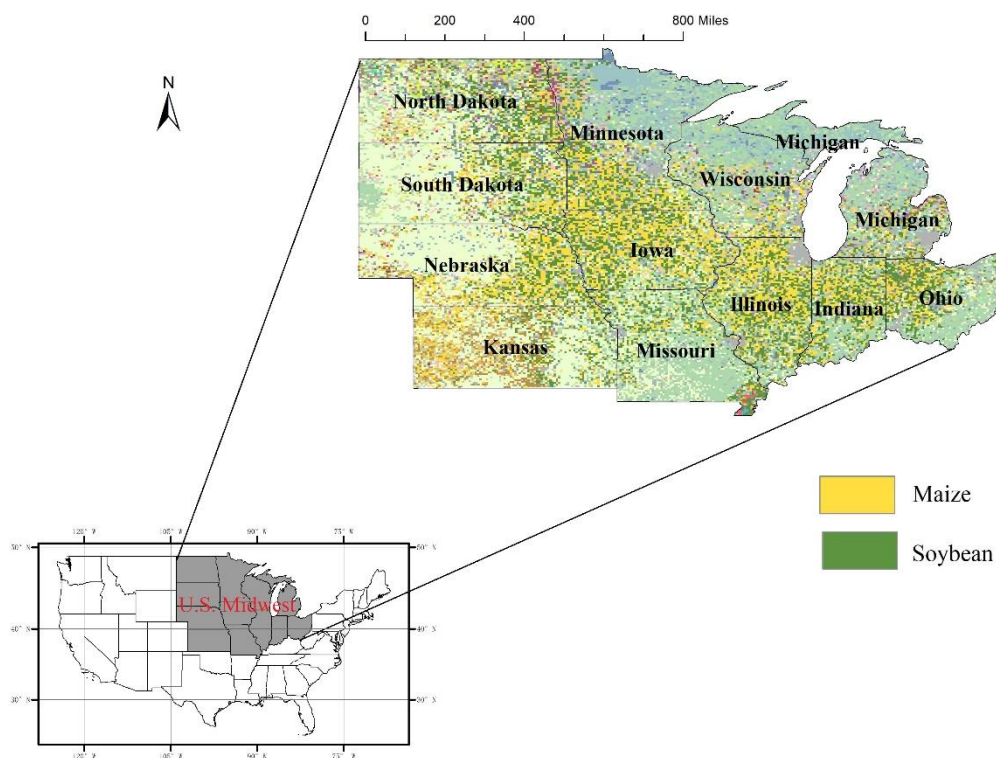


图 2-1 研究区域在美国中西部玉米和大豆空间分布图

Figure 2-1 Spatial distribution of maize and soybean in the study area in the Midwest United States

2.1.2 站点 EC 通量和 SIF 数据

本研究使用来自美国 (<https://fluxnet.org/data/download-data/> , <https://climatesciences.jpl.nasa.gov/sif/>) 和中国 (<https://data.tpc.ac.cn/home> , <https://chinaspec.nju.edu.cn/>) 的八个农田通量站和光谱观测站的观测数据进行 APSIM-SIF 模型的光合模块与荧光模块的校准和评估 (表 2-1)。EC 通量数据和地面作物生长观测数据是在美国内布拉斯加大学梅德东部内布拉斯加研究和推广中心的两个 AmeriFlux 农业站 (US-Ne2 和 US-Ne3) 测量的。US-Ne2 (41.1649°N, 96.4701°W) 是一个配备有中央转轴系统的灌溉站点; US-Ne3 (41.1797°N, 96.4397°W) 是一个雨养站点。两个站点都使用玉米-大豆轮作种植系统。由于 US-Ne2 和 US-Ne3 站点田间数据收集的完整性, 包括 EC 通量和气象测量, 以及详细的地面作物生长观测数据 (例如地上生物量和 LAI) (Peng et al., 2018), 这两个站点是用于校准 APSIM-SIF 模型在灌溉和雨养玉米模拟的主要站点。其他基于地面的 EC 通量和 SIF 数据 (760 nm) 的观测数据来自于中国甘肃省张掖的大满站 (CN-Dm, 100.3722°E, 38.8555°N)。该站点的主要作物类型为灌溉玉米, 通常在 5 月初播种, 9 月中旬收获。大满站的 SIF 观测系统安装在一个通量塔上, 距离地面 25 米。SIF 观测系统主要组件是 QE65PRO 光谱仪 (Ocean Optics, Inc.), 其光谱范围为 645-805 nm, 光谱分辨率为 0.34 nm, 光谱采样间隔为 0.17 nm, 信噪比为 1000。有关 SIF 观测的详细信息可参考 (Liu et al., 2021)。在玉米生长季内收集到 2018 年第 150 天到第 230 天的 SIF 测量数据和 EC 通量数据。同时在这三个 EC 通量塔周围安装有气象测量系统, 可以测量每日最高温度、最低温度、降水和太阳辐射数据, 作为 APSIM-SIF 模拟的气象驱动数据。研究站点的土壤参数是从 GSDE 数据集中估计得到 (见下文)。通过比较 2011 年和 2013 年作物生长季 US-Ne2 和 US-Ne3 站点的模拟 GPP、地上生物量和 LAI 与相应的测量结果, 评估了 APSIM-DCaPST 模拟玉米光合生产力方面的性能。由于 US-Ne2 和 US-Ne3 也是校准站点, 因此本研究选用来自 AmeriFlux 另外三个农业站点 (伊利诺伊州 Champaign 附近的 Bondville (Bo1)、爱荷华州 Ames 附近的 Brooks Field Site 10 (Br1) 和明尼苏达州明尼阿波利斯附近的 Rosemount-G21 (Ro1)) 更独立地评估 APSIM-DCaPST 的光合模拟性能。这三个站点都是雨养条件下的玉米-大豆轮作种植系统 (表 2-1)。地面冠层顶 (TOC) SIF 测量和 CN-Dm 站点的 EC 通量观测的 GPP 也被用于评估 APSIM-SIF 模型。US-Ne2、US-Ne3 和 CN-Dm 站点土壤参数来自于 GSDE (见下文), 具体参数见表 2-2。

本研究选取美国爱荷华州中部的 2 个美国农业部的农业站点 (Coles Field 玉米和 Brook Field 大豆, 表 2-1) 作为改进版本的 APSIM-SIF 模型 (APSIM-SIF V2) 测试站点, 这两个站点均有冠层尺度 SIF、EC 和气象数据, 其中 Coles Field 位于 42.59°N, 93.53°W, 玉米于 2017 年 5 月下旬种植后至 2017 年 9 月收获; Brooks Field 位于 41.97°N, 93.69°W, 大豆于 2017 年 5 月底种植后至 2017 年 9 月收获。这两个站点耕作系统采取

美国中西部玉米种植带的典型方式(Dold et al., 2017)。30 分钟 EC 数据中过滤掉不利天气条件下的数值(例如, 降雨、低风速和高湿度)(Baker and Griffis, 2005), 筛选异常值(Dold et al., 2017), 并填补缺失值。并使用夜间法(Reichstein et al., 2005)将 NEE 划分为 GPP 和生态系统呼吸。在玉米和大豆作物生长期间, 使用 PhotoSpec 荧光观测系统(Grossmann et al., 2018)从农田冠层顶部获取 SIF 信号。PhotoSpec 由一个 2D 扫描望远镜组成, 它将反射的辐射引导到一套高分辨率光谱仪中, 利用太阳夫琅和费线填充方法计算 SIF(Grossmann et al., 2018)。该系统包括三个光谱仪: 两个 QEPRO 光谱仪(Ocean Optics, Inc., Florida, USA) 分别覆盖 650-712 nm 和 729-784 nm 波长范围, 用于检测红光和远红外波长的 SIF, 以及一个 Flame 光谱仪(Ocean Optics, Inc., Florida, USA), 覆盖 177-874 nm 波长范围, 用于测量冠层反射率和计算植被指数。PhotoSpec 系统安装在距离地面 7 米高的塔基上, 其视场角度为 0.7° , 直径约为 5 至 20 厘米(He et al., 2020)。通过计算每 30 分钟时间步长上所有视角的“冠层平均”, 以匹配 EC 数据的时间分辨率(Magney et al., 2019)。

表 2-1 用于模型校准和评估的作物通量观测站相关信息

Table 2-1 Crop flux observation station information for model calibration and evaluation

站点 ID	纬度	经度	时期	农田类型及轮作方式	文献来源
US-Ne2	41.1649	-96.4701	2003 ¹ -2009 ¹ , 2011 ² , 2013 ²	灌溉, 2009年之前奇数年为玉米和偶数年为大豆, 2009年之后为玉米	(Peng et al., 2018; Suyker et al., 2005)
US-Ne3	41.1797	-96.4397	2003 ¹ - 2009 ¹ , 2011 ² , 2013 ²	雨养, 奇数年为玉米和偶数年为大豆	(Peng et al., 2018; Suyker and Verma, 2012)
US-Bo1	40.0062	-88.2904	2000 ² -2007 ²	雨养, 奇数年为玉米和偶数年为大豆	(Bernacchi et al., 2005; Peng et al., 2018)
US-Br1	41.9749	-93.6906	2007 ² -2011 ²	雨养, 奇数年为玉米和偶数年为大豆	(Hernandez-Ramirez et al., 2011; Peng et al., 2018)
US-Ro1	44.7143	-93.0898	2008 ² -2015 ²	雨养, 奇数年为玉米和偶数年为大豆	(Griffis et al., 2008; Peng et al., 2018)
CN-Dm	38.8555	100.3722	2018 ²	灌溉, 玉米	(Liu et al., 2021)
Brooks Field	41.9745	-93.6937	2017 ²	雨养, 大豆	(He et al., 2020)
Coles Field	42.4884	-93.5226	2017 ²	雨养, 玉米	(He et al., 2020)

¹校准和²评估

表 2-2 研究地点的土壤特征参数包括不同土层的土壤容重 (BD)、土壤通过蒸发可以干燥的土壤含水量极限 (Airdry)、土壤含水量排水下限 (LL15)、土壤含水量排水上限 (DUL) 和饱和含水量 (SAT)

Table 2-2 Soil characteristic parameters of the study site, including soil bulk density (BD), air-dry soil moisture limit through evaporation (Airdry), lower limit of soil water content (LL15), upper limit of drained soil water content (DUL), and saturated soil water content (SAT) for different soil layers.

深度 (cm)	BD (g cm ⁻³)	Airdry (m ³ m ⁻³)	LL15 (m ³ m ⁻³)	DUL (m ³ m ⁻³)	SAT (m ³ m ⁻³)
S-Ne2 和 US-Ne3					
0-4.5	1.480	0.076	0.151	0.331	0.442
4.4-9.1	1.480	0.076	0.151	0.331	0.442
9.1-16.6	1.480	0.078	0.156	0.331	0.442
16.6-28.9	1.480	0.150	0.166	0.331	0.442
28.9-49.3	1.500	0.180	0.200	0.325	0.434
49.3-82.9	1.550	0.225	0.225	0.311	0.415
82.9-138.3	1.610	0.177	0.177	0.294	0.392
138.3-229.6	1.610	0.161	0.161	0.294	0.392
CN-Dm					
0-4.5	1.200	0.052	0.104	0.359	0.456
4.4-9.1	1.220	0.052	0.104	0.359	0.456
9.1-16.6	1.290	0.052	0.104	0.359	0.456
16.6-28.9	1.410	0.096	0.107	0.358	0.460
28.9-49.3	1.470	0.096	0.107	0.355	0.459
49.3-82.9	1.480	0.107	0.107	0.332	0.454
82.9-138.3	1.460	0.117	0.117	0.339	0.465
138.3-229.6	1.460	0.118	0.118	0.315	0.460

2.1.3 区域作物分布、土壤与气象数据

2018 年玉米和大豆的种植空间分布 (图 2-1) 来自于美国农业部 NASS 作物土地数据层 (CDL) 数据集 (<https://nassgeodata.gmu.edu/CropScape/>)。CDL 数据集提供了自 2008 年以来, 美国境内每年 30 米空间分辨率的作物分布图。日均气象输入数据, 包括最高和最低温度、降水量和太阳辐射, 来自于 Daymet V3 (<https://daymet.ornl.gov/>) 数据集 (Thornton et al., 2017)。所需的土壤数据是从栅格化的全球土壤数据集 (GSDE, <http://globalchange.bnu.edu.cn/research/soilw>) (Shangguan et al., 2014) 中估算的。GSDE 提供了以 30 秒角度空间分辨率的全球土壤信息。土壤性质的垂直变化以八个层次进行表示, 最大深度为 230 厘米。GSDE 的每个土壤层次的容重 (BD, g cm⁻³)、排水下限 (LL15,

$\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)、排水上限 (DUL, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) 和饱和含水量 (SAT, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) 均从 GSDE 中获取, 表层土壤参数分布图见图 2-2。BD 直接来自于 GSDE; LL15、DUL 和 SAT 是从砂土和粘土的百分比中计算得到(Saxton et al., 1986)。

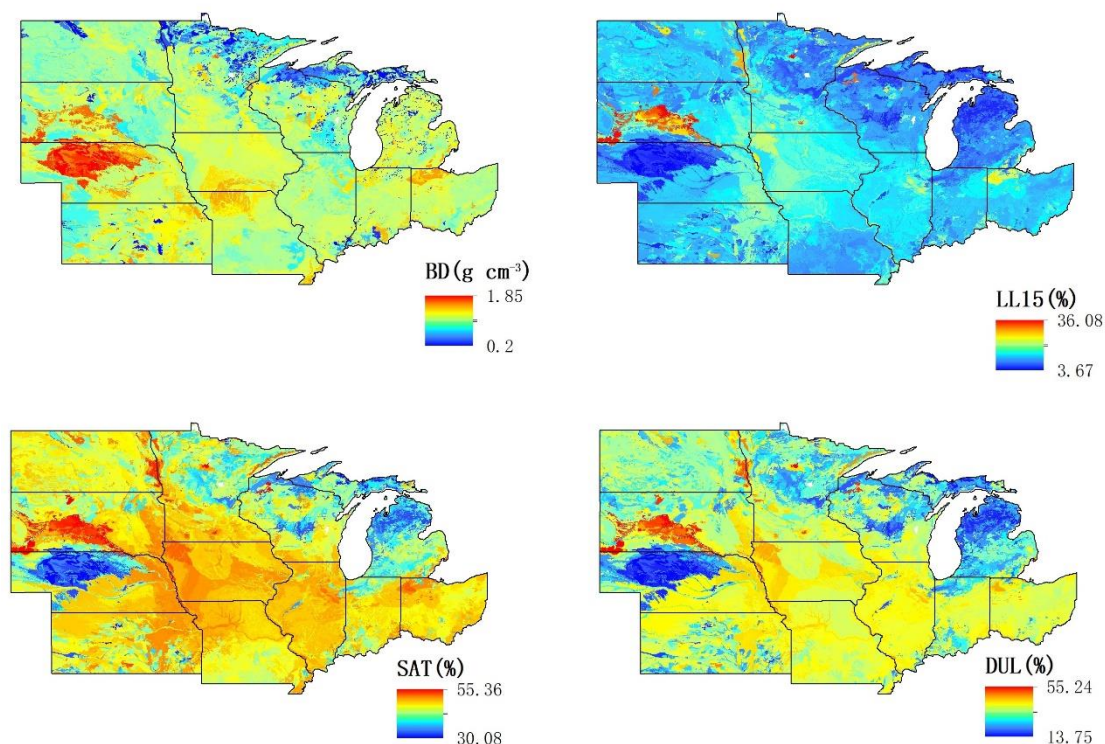


图 2-2 美国中西部土壤参数 (表层) 的空间分布: 容重 (BD, g cm^{-3})、排水下限 (LL15, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)、饱和含水量 (SAT, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) 和排水上限 (DUL, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)。

Figure 2-2 Spatial distribution of soil parameters (surface layer) in the Midwest United States: bulk density (BD, g cm^{-3}), lower limit of available water (LL15, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), saturated water content (SAT, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), and upper limit of available water (DUL, $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$).

2.1.4 TROPOMI SIF 数据集

本研究使用来自 Sentinel-5P 卫星搭载的 TROPOMI 传感器的 SIF 数据产品 (<ftp://fluو.gps.caltech.edu/data/tropomi/>) 来评估 APSIM-SIF 模型模拟的 TOC SIF 在区域尺度上的准确性。该卫星于 2017 年 10 月发射, 以大约 7km 的空间分辨率和 1 天的重访周期在全球范围内提供连续的 SIF 监测(Köhler et al., 2018)。Köhler 等(2018)开发了一种基于奇异值分解的数据驱动方法, 从 TROPOMI 辐射能量中检索到 740 nm 的 SIF。本研究使用 2018 年 5 月至 2019 年 12 月的数据, 去除云量高于 0.15 的数据。使用 TROPOMI SIF 数据产品中提供的修正因子(Köhler et al., 2018)将瞬时 SIF 转换为日

平均 SIF。为确保观测方向与卫星 SIF 观测方向保持一致, R_{NIR} 计算为 TROPOMI SIF 产品中近红外反射辐射(平均在 743 nm~758.5 nm 之间)和相应太阳辐照度之比(Zhang et al., 2019)。为了最小化观测方向与太阳角度不同带来的潜在季节效应(Strahler et al., 1999), 使用 MODIS Nadir BRDF-Adjusted Reflectance (NBAR) 产品 (MCD43A4.006) 计算 NDVI, 该产品具有 500 m 的空间分辨率。使用 Google Earth Engine (GEE, <https://earthengine.google.com>) 平台将 MODIS NDVI 产品重新采样到 TROPOMI SIF (7 km × 7 km) 的空间分辨率。

最近, Guanter 等(2021)发布了一个新的 TROPOMI SIF 数据产品(TROPOMI-L2B, <http://ftp.sron.nl/open-access-data-2/TROPOMI/tropomi/sif/v2.1/12b/>), 提供了两个 SIF 检索窗口分别是 743-758 nm 和 735-758nm, 并在 665-785 nm 范围包括 7 个波段(665、680、712、741、755、773 和 781 nm) 的反射率数据等辅助数据集。743-758 nm 的 SIF 检索窗口有更多的 SIF 数据因此本研究选择 743nm 的 SIF 进行比较。由于在 Coles 和 Brooks 站点上只提供了 2017 年的地面 SIF 观测数据, 因此为了验证改进的 APSIM-SIF 模型在不同年份干旱胁迫下的模拟能力, 本研究选择 2018-2021 年遥感 TROPOMI-L2B 的 SIF 数据进行改进的 APSIM-SIF 模型评价。本研究选择 665 nm 和 781 nm 作为 R_{RED} 和 R_{NIR} 来计算 f_{APAR} 和 NDVI。本研究提取了以两个站点为中心 0.05°范围内的所有 SIF 点, 去除掉云量大于 0.2 的数据, 并按天取平均, 以获取较长时间序列的 SIF 观测数据。

2.1.5 干旱指数

干旱指数通常被用作干旱状况的替代指标(Anderson et al., 2011; Zargar et al., 2011)。本研究利用美国干旱监测图 (USDM, <https://droughtmonitor.unl.edu/>) 识别研究地点的干旱状况。USDM 使用各种指标来跟踪水周期的不同组成部分, 如降水、土壤水分、水流和径流, 以提供不同时间尺度和地区水状况的定量(干旱强度)和定性(社会影响评估)信息(Svoboda et al., 2002)。本研究使用 2018 年至 2021 年两个站点 (Brooks Field 和 Coles Field) 所在县 (美国爱荷华州汉密尔顿和美国爱荷华州斯托里郡) 的干旱严重程度和覆盖指数 (DSCI)。DSCI 指数是用于将 USDM 中的干旱级别转换为一个地区的单一值的实验方法(Jones and van Vliet, 2018)。DSCI 变化范围从 0 到 500, 0 表示该地区没有处于干旱状态, 500 表示该地区都处于异常干旱状态。

2.1.6 作物产量数据

本研究从美国农业部国家农业统计局 (USDA NASS) 的快速统计数据库 (<https://quickstats.nass.usda.gov/>) 获得了美国中西部三个农业种植面积较大的州 (爱荷华州、印第安纳州、伊利诺伊州) 在 2018-2021 年作物的县级玉米作物平均产量、总产量和种植面积。将美国农作物玉米产量从 bu/acre 单位转换 kg/ha 单位需要 62.77 的转化

系数。

2.2 APSIM 模型

APSIM (Agricultural Production Systems sIMulator, <https://www.apsim.info/>) 是一种开放源代码、过程模拟的作物模型, 能够对不同作物、土地利用方式和管理措施进行模拟和优化, 以支持农业决策和规划(Holzworth et al., 2014)。APSIM 可以模拟作物生长、生理和生态过程, 包括气象、土壤水分、养分吸收、光合作用、蒸腾等, 从而预测作物的生长和产量。该模型可以适用于不同的生态区域、作物和管理方法, 可以用于预测不同气候条件下的作物产量、土地管理决策、水分和养分管理、气候变化的影响等。目前, APSIM 已经成为全球范围内广泛使用的作物生长模型之一。

APSIM 模型主要由以下几个模块组成:

- 1) 气象模块: 用于模拟的气象数据输入, 包括最高温、最低温、降水、太阳辐射等。
- 2) 土壤模块: 用于模拟土壤水分和养分的动态变化过程, 包括土壤含水量、土壤蒸发、养分吸收、转运和释放等。
- 3) 作物管理模块: 用于模拟不同管理措施对作物生长和产量的影响, 包括种植日期、品种选择、灌溉和施肥等。
- 4) 作物品种模块: 用于模拟作物的生长、发育和生理过程, 包括光合作用、生长时期、叶面积指数、蒸腾等。

APSIM 模型的优势在于其可扩展性和灵活性, 即可通过添加、删除或替换模块来适应不同的农作物、管理实践和环境条件。这种模块化的架构使得 APSIM 模型可以灵活地与其他模型、软件和数据集进行集成, 从而使其具有很强的可移植性和互操作性。因此, APSIM 模型的用户可以根据自己的需要定制模型, 使其适合他们的具体研究目的。此外, 由于 APSIM 模型具有开放的接口和标准化的数据格式, 因此可以方便地将其与其他软件和工具集成, 例如 GIS、遥感和统计软件, 从而实现更全面、准确和实用的农业决策支持系统。基于上述优点我们选择 APSIM 模型进行 SIF 模块耦合。

2.3 APSIM-SIF 模型校准、优化与模拟

2.3.1 模型校准

为了进行模型校准, 玉米的品种参数(表 2-3)是通过最小化站点(US-Ne2 和 Ne3)观测与模拟的地上生物量和 LAI 的均方根误差(RMSE)来确定的。由于缺乏大豆地上生物量和 LAI 的测量, 因此大豆的品种参数被设置为默认值(表 2-4)。DCaPST 模块中的三个重要参数($\chi_{Vcmax25}$, χ_{Jmax25} , χ_{gm} , 表 2-5)也通过使用这两个站点的每日

GPP 时间序列进行优化。同时，基于每日 GPP 数据优化播种日期和种植密度等参数，并根据该地区的典型农业管理措施设置其他管理参数(Kukul and Irmak, 2020)。这些参数被假定在研究区域内保持不变（表 2-6）。按照 Reichstein 等(2005)提出的方法，从生态系统呼吸和 CO₂ 净生态系统交换（NEE）之间的差异中分离得到半小时的 GPP 值。通过 REddyProc 工具（<https://www.bgc-jena.mpg.de/bgi/index.php/Services/REddyProcWeb>）进行通量数据插补与拆分处理，该工具由德国比格地球化学研究所的 Max Planck 研究所提供(Wutzler et al., 2018)。通过计算 6:00 到 18:00 的 GPP 数据得到日均 GPP 值，以匹配 APSIM-DCaPST 的每日 GPP 模拟(Wu et al., 2019)。

表 2-3 APSIM-SIF 模拟中使用的玉米品种参数

Table 2-3 Maize cultivar parameters used in APSIM-SIF simulation

参数	描述	值
tt_emerg_to_endjuv	从出苗到营养生长期结束的热量时间 (°C·d)	275
tt_flower_to_maturity	从开花到成熟的热量时间(°C·d)	1100
photoperiod_crit1	光周期阈值 1	12.5
photoperiod_crit2	光周期阈值 2	20
photoperiod_slope	每小时光周期增加所需的热量时间变化 (°C·h ⁻¹)	0
tt_flower_to_start_grain	从开花到开始灌浆的热量时间 (°C·d)	170
potKernelWt	种子大小除以灌浆阶段的持续时间参数	300
y_height	冠层高度 (mm)	3000
tt_flag_to_flower	从旗叶到开花的热量时间(°C·d)	1

表 2-4 APSIM-SIF 模拟中使用的大豆品种参数
Table 2-4 Soybean cultivar parameters used in APSIM-SIF simulation

参数	描述	值/范围
y_hi_max_pot	最大收获指数潜力	0.5
y_hi_incr	收获指数增加速率 (1/d)	0.011
x_pp_hi_incr	光周期 (h)	1 24
tt_emergence	从出苗到营养生长期结束的热量积累 (°C·d)	60
est_days_emerg_to_init	从出苗到花芽分化的预计天数 (d)	20
x_pp_end_of_juvenile	光周期 (h)	12 18
y_tt_end_of_juvenile	从营养生长期结束到花芽分化的热量积累 (°C·d)	350 850
x_pp_floral_initiation	光周期 (h)	1 24
y_tt_floral_initiation	从花芽分化到开花的热量积累(°C·d)	24
x_pp_flowering	光周期 (h)	1 24
y_tt_flowering	从开花到开始灌浆的热量积累 (°C·d)	300
x_pp_start_grain_fill	光周期 (h)	1 24
y_tt_start_grain_fill	开始灌浆的热量积累 (°C·d)	460.0
tt_end_grain_fill	结束灌浆的热量积累 (°C·d)	40
tt_maturity	从成熟到收获期的热量积累 (°C·d)	5
x_stem_wt	茎重 (g/plant)	0 10
y_height	植株高度 (mm)	0 1200

表 2-5 DCaPST 模块玉米和大豆的光合参数
Table 2-5 Photosynthesis parameters for maize and soybean in the DCaPST module

参数	描述	单位	大豆	玉米
$\chi_{V_{cmax25}}$	最大羧化速率 (25°C下) 与比叶氮含量之间的线性关系斜率	mmol CO ₂ mol ⁻¹ N s ⁻¹	1	0.4
$\chi_{J_{max25}}$	最大电子传递速率 (25°C下) 与比叶氮含量之间的线性关系斜率	mmol CO ₂ mol ⁻¹ N s ⁻¹	0.85	3.12
χ_{gm}	叶肉导度 (25°C下) 与比叶氮含量之间的线性关系斜率	mol CO ₂ s ⁻¹ bar ⁻¹ mmol ⁻¹ N	0.0053	0.005

表 2-6 玉米和大豆农田管理参数

Table 2-6 Field management parameters for corn and soybean

参数	单位	大豆	玉米
开始日期	yyyy/mm/dd	2017/01/01	2017/01/01
结束日期	yyyy/mm/dd	2019/12/31	2019/12/31
播种日期	mm/dd	05/26	05/08
种植密度	株 m ⁻²	35	8.5
播种深度	mm	32	64
行距	mm	762	762
种植时氮肥施用量	kg ha ⁻¹	150	173
土壤深度	cm	229.6	229.6
初始状态下土壤含水量	%	50	50
初始状态下土壤 NO ₃ 含量	kg ha ⁻¹	94.2	94.2
初始状态下土壤 NH ₄ 含量	kg ha ⁻¹	5.9	5.9
灌溉	-	自动灌溉	自动灌溉

2.3.2 敏感性分析

确定关键模型参数对于作物模型参数优化至关重要。敏感性分析可以通过量化模型输入参数对模型输出结果的影响来帮助识别这些关键参数。本研究进行全局敏感性分析，以确定 DCaPST 光合模块参数对 SIF_{tot} 模拟的影响。本研究使用了基于方差分析的 Sobol 方法，并利用 R 包“sensitivity”来计算敏感性指数。敏感性指数衡量了输出结果方差受各个输入参数方差的贡献比例。一阶敏感性指数衡量了单个输入参数的影响，而总效应敏感性指数衡量了输入参数本身以及与其他输入参数的所有相互作用的影响。敏感性分析需要进行 $N \times (k+2)$ 次模拟，其中 N 是样本大小，本研究设置为 1000， k 是输入参数的数量。本研究使用了 12 个参数进行 APSIM-SIF 模型的敏感性分析，因此需要进行 14000 次模拟。参数的变化范围如表 2-7 所示。

表 2-7 DCaPST 光合模块敏感性分析参数列表

Table 2-7 Sensitivity analysis parameter list for DCaPST photosynthesis module

参数	描述	单位	默认值	最小值	最大值
$\chi_{V_{cmax25}}$	25°C 下最大净光合速率 (V_{max}) 与叶片氮含量 (N) 之间的线性关系斜率	$\mu\text{mol CO}_2 \text{ mmol}^{-1} \text{ N s}^{-1}$	0.47	0.23	0.70
$\chi_{J_{max25}}$	25°C 下最大电子传递速率 (J_{max}) 与叶片氮含量 (N) 之间的线性关系斜率	$\mu\text{mol CO}_2 \text{ mmol}^{-1} \text{ N s}^{-1}$	2.70	1.35	4.05
χ_{SLN}	叶片氮含量依赖的叶片光合胁迫因子	-	0.65	0.33	0.98
LW	叶片厚度	cm	0.150	0.075	0.225
SLN_{top}	顶部 SLN 与整个冠层平均 SLN 之比	-	1.30	0.65	1.95
Min_N	最小氮含量	-	14	7	21
ALA	冠层平均叶倾角	Degree	60	30	90
k'_d	漫射和散射的漫射 PAR 消光系数	-	0.78	0.62	0.94
k'_{d_NIR}	漫射和散射的漫射 NIR 消光系数	-	0.80	0.64	0.96
ρ_{cd}	漫反射 PAR 的冠层反射系数	-	0.0360	0.0288	0.0432
ρ_{cd_NIR}	漫反射 NIR 的冠层反射系数	-	0.389	0.311	0.467
σ	PAR 的叶片反射系数	-	0.15	0.12	0.18

2.3.3 优化算法

通过敏感性分析 (第 2.3.2 节), 本研究可以获得影响荧光模拟的关键光合模块相关参数, 本研究通过优化 APSIM-SIF 模型的光合模块参数值, 最小化 APSIM-SIF 模拟和 TROPOMI 测量得到的冠层总荧光之间的均方根误差 (RMSE), 检验 SIF 对作物产量模拟的约束能力。为了实现这一目标, 本研究采用了粒子群优化算法 (PSO) 进行参数优化 (Poli et al., 2007)。本研究选择 PSO 算法是因为它能够在较大参数空间内高效地搜索最优参数值。该算法通过创建一群粒子来实现, 每个粒子代表参数空间中的一个潜在解决方案。然后, 这些粒子在空间中移动, 受其当前位置和运算结束为止任何粒子找到的最佳位置的引导。算法迭代更新粒子的位置和速度, 直到收敛到最优参数值。

2.3.4 情景模拟

为研究不同干旱胁迫下叶片生理和冠层结构对 SIF 与 GPP 的线性关系的影响, 本研究构建了一系列模拟情景。这些情景包含 4 种气象条件变化、2 种植物生理响应行为和 2 种冠层结构变化, 共有 16 个情景模拟设置, 如表 2-8 所示。气象条件包括温度和

降雨的变化，分别是温度和降水不发生变化的对照组、每天平均温度增加 2°C、每天降水减少 10% 以及持续干旱情景（温度升高同时降水减少）。植物生理响应行为是叶片氮依赖性光合胁迫因子（SF）和冠层平均叶倾角（ALA）的变化，考虑了其四种不同的组合：ALA 从 60 度增加到 80 度，SF 从 0.6 降至 0.3，ALA 和 SF 同时改变，以及 ALA 和 SF 保持不变。

表 2-8 APSIM-SIF 模拟场景

Table 2-8 APSIM-SIF simulation scenarios

场景	环境因素	植物生理和结构因素
1	正常情况	ALA 从 60 度增加到 80 度
2	正常情况	SF 从 0.6 降至 0.3
3	正常情况	ALA 和 SF 同时改变
4	正常情况	ALA 和 SF 不变
5	每日降水减少 10%	ALA 从 60 度增加到 80 度
6	每日降水减少 10%	SF 从 0.6 降至 0.3
7	每日降水减少 10%	ALA 和 SF 同时改变
8	每日降水减少 10%	ALA 和 SF 不变
9	每日温度升高 2°C	ALA 从 60 度增加到 80 度
10	每日温度升高 2°C	SF 从 0.6 降至 0.3
11	每日温度升高 2°C	ALA 和 SF 同时改变
12	每日温度升高 2°C	ALA 和 SF 不变
13	干旱	ALA 从 60 度增加到 80 度
14	干旱	SF 从 0.6 降至 0.3
15	干旱	ALA 和 SF 同时改变
16	干旱	ALA 和 SF 不变

2.4 叶片生理实验设备与实验设计

2.4.1 叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量设备

叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量设备由 JUNIOR-PAM 荧光仪(JUNIOR-PAM, Heinz Walz GmbH, Germany)、LI-6800 光合测量仪(LI-COR Biosciences, Nebraska, USA)、QEPro 高灵敏度光谱仪(Ocean Optics, Dunedin, FL, USA)和 HR2000+光谱仪(Ocean Optics, Dunedin, FL, USA)以及 LED 冷光源(S5000-LED)组装的叶室构成（如图 2-3 所示）。JUNIOR-PAM 使用峰值为 465 nm 的蓝色 LED 发光二极管作为光源，发射测量光的标准强度为 $0.1 \mu\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ ，最大饱和闪光(饱和脉冲光)强度可达 $10000 \mu\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

$^2 \cdot s^{-1}$, 光化光强度范围为 $25 \sim 1500 \mu\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 。LI-6800 光合测量仪不仅可以测量气体交换参数, 还可以控制叶室的环境条件(光照、温度、VPD、 CO_2)。为了消除光呼吸对测量结果的影响, 使用低氧气体(2%氧气; 98%氮气)代替环境空气通入到光合仪叶室内, 从而抑制植物光呼吸, 以便精确测量植物叶片的光合特征参数。QEPro 通过快门和分叉光纤对上行和下行叶绿素荧光光谱进行测量, HR2000+同样通过快门和分叉光纤对叶片反射光和透射光光谱进行测量。QEPro 光谱仪测量波段范围为 649-799 nm, 光谱分辨率和采样间隔为 1.713 nm 和 0.143 nm; HR2000+光谱仪测量 296-1203 nm 范围内光谱信息, 其光谱分辨率和采样间隔为 5.332 nm 和 0.443 nm。冷光源作为试验中外置光化光光源, 在光源出光口处加上 625 nm 短波通滤光片, 从而滤掉与叶绿素荧光波段重合的光谱波段, 以便可以测量 649-799 nm 波段范围的叶绿素荧光光谱。具体测量参数见表 2-9。

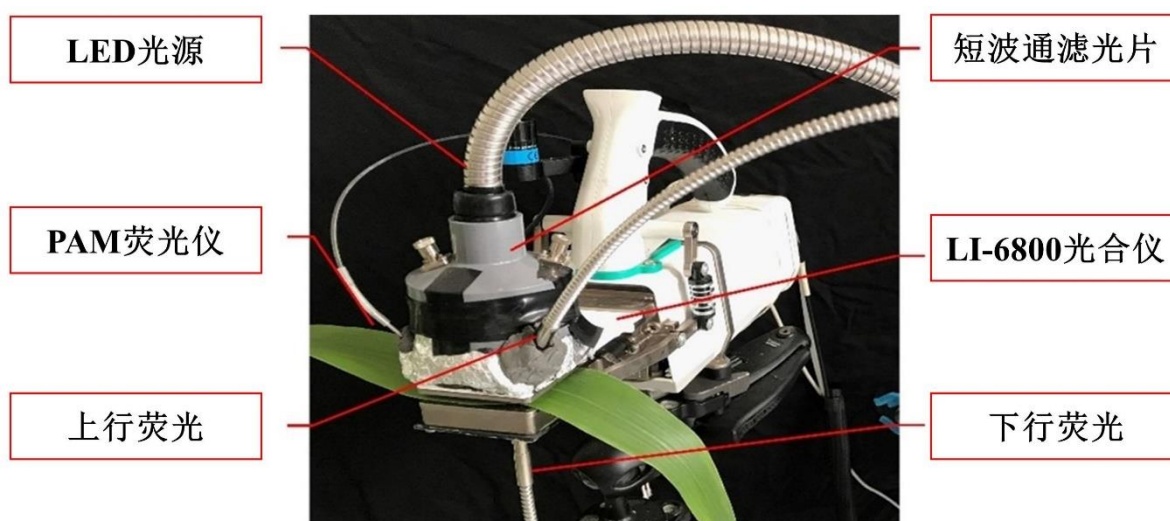


图 2-3 叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量设备

Figure 2-3 Synchronized measurement equipment for chlorophyll fluorescence-photosynthesis-NPQ

表 2-9 叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量设备测量参数列表

Table 2-9 Measurement parameter list for chlorophyll fluorescence-photosynthesis-NPQ synchronized measurement equipment

参数	符号	描述	计算公式/单位
荧光动力学参数	F_0, F'_0	暗适应状态或光化光状态, Q_A 最大氧化, PSII 开放, 暗室或近红外条件下得到的最低水平荧光	
	F_m, F'_m	暗适应状态或光化光状态, Q_A 最大还原, PSII 关闭, 饱和闪光条件下得到的最大荧光水平	
	F_v, F'_v	暗适应状态或光化光状态, 可变荧光。说明了 PSII 进行光化学的能力(Q_A 还原能力)	
	F_s	光化光的条件下, 稳态荧光	
	$\Phi_{PSII\max}$	PSII 光化学最大量子产量: PSII 吸收的光能用于还原 Q_A 的最大效率	$1 - F_0/F_m$
	Φ_P	PSII 实际光化学量子产量	$1 - F_s/F'_m$
	NPQ	从 F_m 到 F'_m 的非光化学淬灭。PSII 热耗散的表观速率。	$F_m/F'_m - 1$
	ETR	PSII 电子传递速率	$PAR \times \Phi_P \times 0.84 \times 0.5$
	q_p	光化学淬灭系数:	$(F'_m - F_s)/(F'_m - F'_0)$
	q_N	非光化学淬灭系数:	$(F_m - F'_m)/(F_m - F'_0)$
	q_L	PSII 开放比例:	$q_p \times F'_0/F$
	Φ_F	荧光量子产量	
叶片光合气体交换参数	A	净光合速率	$\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
	E	蒸腾速率	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
	g_{sw}	气孔导度	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
	A_{dark}	暗呼吸速率	$\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
	Φ_{CO_2}	基于 CO_2 同化效率的光化学量子产量	$\mu\text{mol } \mu\text{mol}^{-1}$
	T_{leaf}	叶片温度	$^{\circ}\text{C}$
	PAR	入射光光合有效辐射强度	$\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
	C_i	胞间二氧化碳浓度	$\mu\text{mol mol}^{-1}$
	Γ^*	二氧化碳补偿点	$\mu\text{mol mol}^{-1}$
VPD	饱和水气压差	kPa	
叶片荧光光谱参数	$\text{Chl}F_{\lambda, \text{up}}$	上行荧光光谱	$\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$
	$\text{Chl}F_{\lambda, \text{down}}$	下行荧光光谱	$\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$
	Ref_{λ}	反射光光谱	$\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$
	Tra_{λ}	透射光光谱	$\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$
	Irrad_{λ}	入射光光谱	$\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$

2.4.2 实验设计

本实验于 2020 年 6 月至 2020 年 9 月在水土保持研究所黄土高原土壤侵蚀与旱地

农业国家重点实验室室内与室外开展。本实验材料玉米品种为郑丹 958，2020 年 6 月初将种子种植于塑料盆栽中（桶径 30 cm、高 40 cm），由当地农田土进行填充，共 40 盆，土壤容重为 1.35 g cm^{-3} ，田间持水量 $0.33 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ ，萎蔫点 $0.07 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ 。待种子发芽后保持每盆 1~2 株作物，将盆栽放入遮雨棚中，常规管理，作物生长过程中土壤含水量维持在田间持水量的 80%左右。

在玉米拔节期选择长势较好的植株进行土壤水分控制，设置土壤水分梯度为：田间持水量的 80%（CK）、70%、60%、50%、40%，每个处理 6 个重复，使用土壤水分探头（HOBO S-SMC-M005）进行土壤含水量的监测。在玉米吐丝期开始实验测量，首先使用 MC100 (MC-100; Apogee Instruments, UT, US) 测量叶片的叶绿素浓度，通过积分球 (ASD Integrating Sphere; ASD Inc, VA, USA) 和便携式光谱仪 (PSR+3500; Spectral Evolution, MA, USA, 350-2500 nm) 对叶片的反射率和透射率进行测量。然后将叶片放入到叶室中进行 30 分钟暗处理，以测量叶片最大光化学量子产量，接着进行光曲线测量，光强梯度为 0、30、50、80、100、150、200、400、600、800、1100、1400、1700、2000、2300、2600 $\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ；其次进行 CO_2 曲线测量， CO_2 梯度为 0、30、50、80、100、150、200、250、300、350、400、500、600、800、1000、1200、1500 $\mu\text{mol} \cdot \text{mol}^{-1}$ ；最后进行温度曲线测量，温度梯度为 15、18、20、23、25、28、30、33、35、38、40 $^\circ\text{C}$ 。在每个环境因素曲线测量前都需要将叶片在 PAR 为 2000 $\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ， CO_2 浓度为 400 $\mu\text{mol} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，温度为 25 $^\circ\text{C}$ ，空气相对湿度为 50% 条件下进行适应，然后再进行测量，以保持叶片的正常活性。

2.5 辐射传输模型模拟

2.5.1 叶片荧光模型（FLUSPECT）模拟

2.5.1.1 荧光激发谱重构

为了解决叶片荧光光谱的测量和 FLUSPECT 模拟之间的系统偏差，本研究进行了荧光激发谱重构。根据 van der Tol 等(2019)的 FLUSPECT 模型进行荧光激发谱的反演方法，本研究在不同光强下同时记录的上行和下行叶绿素荧光光谱，接着利用 FLUSPECT 模型反演出荧光激发谱和荧光总激发效率。荧光激发谱重构分为以下三个阶段：在第一阶段，利用叶片反射率和透射率数据，通过 FLUSPECT 模型得到叶片七个生化参数，即叶绿素（Cab）、类胡萝卜素（Cca）、干物质（Cm）、花青素（Cant）和叶水含量（Cw）、叶片衰老参数（Cs）和叶肉厚度参数（N），通过优化算法，最小化测量与模拟的叶片反射率和透射率构成的代价函数，叶片生化参数的反演主要基于 FLUSPECT 中的 PROSPECT（叶片反射率模型）模块模拟过程，不受到荧光激发谱的影响。

在第二阶段，将第一阶段获得的生化参数输入到 FLUSPECT 模型中，用上行与下

行荧光光谱去反演荧光激发谱和荧光总激发效率参数。由于本研究测量的叶绿素荧光光谱只到 799nm 波段，因此不能直接校准全波段荧光激发谱。本研究改用 80 个波段（640 到 800 nm 每隔 1nm）荧光激发谱参数进行校准，然后通过线性插值以得到一个平滑荧光激发谱曲线，通过使用线性插值强制在 850 nm 处为零来外推荧光激发谱。包括荧光总激发效率在内，共有 81 个系数需要校准，本研究采用 MATLAB（2018a）的 ‘lsqnonlin’ 函数去进行优化。

在第三阶段，进行荧光激发谱的分解与重构。在第二阶段本研究可以获得每个光强下荧光激发谱，因此可以构成一个二维矩阵 F ，其中行表示样本，列表示光谱波段。本研究可以使用奇异值分解（SVD）方法将 F 分解为三个矩阵 $F=USV^T$ ，其中 U 和 V 是 F 的左奇异矩阵和右奇异矩阵， S 是一个对角矩阵，其奇异值按降序排列。然后可以用所有左奇异向量和右奇异向量的线性组合来重构矩阵 F ：

$$F = \sum_{i=1}^n u_i \cdot s_i \cdot v_i^T \quad (2-1)$$

式中， u_i 是一个左奇异向量 ($n \times 1$)，包含了每个样本的权重， v_i 是一个右奇异向量 (211×1)，在 640-850 nm 的光谱区域内， s_i 是主成分（PC）的奇异值。本研究用光谱权重 ($s_i \cdot v_i^T$) 作为代表荧光激发谱谱形的 PC。 $s_i \cdot v_i^T$ 的奇异值 s_i 越大，就表示对荧光激发谱形状的贡献越大。对于每个 PC，本研究计算了其解释方差，即每个 s_i 值与所有 s_i 值之和的比率。样本权重 (u_i) 给出了每个样本对 PC 的相对影响。一般来说，使用的 PC 数量越多，荧光激发谱就能被更精确地重构。然而，本研究发现前三个主成分就可以解释超过 90% 的光谱方差。因此，本研究选取前三个主成分进行荧光激发谱的重构：

$$\varphi(\lambda) = u_1 \cdot \text{PC1} + u_2 \cdot \text{PC2} + u_3 \cdot \text{PC3} \quad (2-2)$$

式中，这些系数 u_1 、 u_2 和 u_3 分别表示 PC1、PC2 和 PC3 相对权重大小，可以与潜在生理参数建立经验关系，以赋予每一个主成分所代表的生理意义。

2.5.1.2 荧光激发效率分离

由 FLUSPECT 模型反演得到的荧光激发效率 (Φ_F) 包含了 PSII 和 PSI 的部分，而从 PAM 得到的荧光主要来自 PSII 反应中心。因此， Φ_F 可以表示为 PSII (Φ_{F_PSII}) 和 PSI (Φ_{F_PSI}) 贡献的总和：

$$\Phi_F = k_{\text{PAM}} \underbrace{\Phi_{\text{F_PSII_PAM}}}_{\Phi_{\text{F_PSII}}} + \Phi_{\text{F_PSI}} \quad (2-3)$$

式中, Φ_F 是光系统总荧光量子产量, 可以通过 FLUSPECT 模型反演结果得到。 $\Phi_{\text{F_PSII_PAM}}$ 是由 PAM 测量的 PSII 的荧光量子产量 ($\Phi_{\text{F_PSII}}$) 的相对值, 因此需要一个校正因子 k_{PAM} 来转换为真实的 $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 值, k_{PAM} 可由 Φ_F 和 $\Phi_{\text{F_PSII_PAM}}$ 的线性回归方程的斜率获得。 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 是待估算的 PSI 的荧光量子产量。通过 Φ_F 减去 $\Phi_{\text{F_PSII}}$, 因此本研究可以获得 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 值。

2.5.2 冠层水平一维荧光辐射传输模型 (SCOPE) 模拟

本研究基于光学反射系数和消光系数, 进行了半球性荧光逃逸概率 (冠层各个方向逃逸出来的荧光的概率) 的公式推导, 并通过 SCOPE 模型模拟进行不同荧光波段光学反射系数和消光系数的估算。公式推导过程如下:

由于 SIF 从叶片到冠层辐射传输过程中受到 (重吸收) 和散射效应影响较大, 根据朗伯比尔定律, 冠层对 SIF 吸收可表示为:

$$\text{SIF}_{\text{abs,can}}(\lambda) = (1 - \rho) \text{SIF}_{\text{tot}}(\lambda) \left[1 - \exp\left(-\frac{k \cdot \Omega \cdot \text{LAI}}{\cos(\theta)}\right) \right] \quad (2-4)$$

式中, $\text{SIF}_{\text{abs,can}}$ ($\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$) 是被冠层吸收的 SIF, ρ 是 SIF 的冠层反射系数, k 是 SIF 冠层消光系数, θ 是太阳天顶角, LAI ($\text{m}^2 \text{m}^{-2}$) 是叶面积指数, Ω 是聚集度指数代表植被冠层叶片的真实空间分布偏离随机分布的程度, 其范围为 0-1, 当叶片处于随机分布时, 值为 1, 而偏离随机分布越大, 值越小, 对于农田本研究假设其处于随机分布状态, 因此 Ω 设置为 1。冠层半球性荧光逃逸概率可以用冠层吸收的荧光和冠层总荧光的比值进行计算, f_{esc} 可以写成:

$$\begin{aligned} f_{\text{esc}}(\lambda) &= 1 - \frac{\text{SIF}_{\text{abs,can}}(\lambda)}{\text{SIF}_{\text{tot}}(\lambda)} = 1 - (1 - \rho) \left[1 - \exp\left(-\frac{k \cdot \text{LAI}}{\cos(\theta)}\right) \right] \\ &= (1 - \rho) \exp\left(-\frac{k \cdot \text{LAI}}{\cos(\theta)}\right) + \rho \end{aligned} \quad (2-5)$$

本研究利用一维荧光辐射传输模型 SCOPE 和 APSIM 模型进行作物生长季冠层荧光逃逸概率模拟仿真, SCOPE 模型可以模拟辐射传输、能量平衡、光合作用, 以及叶片与冠层不同尺度的全波谱 SIF, 同时也可以模拟不同观测方向 SIF。根据在玉米站点模拟的 APSIM 结果, 本研究获得玉米生长期叶片最大光合羧化速率 (V_{cmax}) 和 LAI 在的变化。利用 APSIM 相同的气象数据 (温度和太阳辐射) 以及 V_{cmax} 和 LAI 作为输入

来驱动 SCOPE 模型，同时还考虑了叶绿素浓度对参数反演的影响，叶绿素浓度从 $10 \mu\text{g cm}^{-2}$ 到 $80 \mu\text{g cm}^{-2}$ 每隔 $5 \mu\text{g cm}^{-2}$ 共进行 15 次模拟。基于 SCOPE 模型输出的冠层半球荧光与冠层中所有叶片释放的荧光比例，计算了半球性荧光逃逸概率；而基于冠层顶部的方向性荧光与冠层中所有叶片释放的荧光比例，计算了方向性荧光逃逸概率。最后通过 Matlab (R2018) 的“lsqcurvefit”函数优化求解方法，通过拟合方程 (2-5) 计算的荧光逃逸概率和 SCOPE 仿真得到的半球荧光逃逸概率，从而获得荧光反射和消化系数随波长和叶绿素浓度变化的参数列表。

本研究使用 SCOPE 模型评估基于光谱不变理论估算的荧光逃逸概率 ($R_{NIR} \cdot NDVI / f_{APAR}$) 方法对方向性荧光逃逸概率估算能力。通过 SCOPE 模型进行了一系列随机模拟以获得不同冠层结构、土壤、叶片属性变化下的荧光逃逸概率，随机改变冠层结构、太阳-传感器几何土壤背景以及叶片光谱属性参数，包括 LAI、叶倾角分布函数、太阳天顶角、视场天顶角、土壤亮度和叶绿素含量 (表 2-10)。

表 2-10 SCOPE 模拟参数列表

Table 2-10 Parameter list for SCOPE simulation

	参数	描述	值
冠层结构	LAI	叶面积指数	0.5, 1, 3, 5
	LIDF	叶倾角分布函数	球形, 亲直形, 亲平形
太阳-传感器几何	SZA	太阳天顶角	20, 30, 40, 50, 60
	VZA	观测天顶角	0, 10, 20, 30, 40, 50, 60
土壤背景	BSMBrightness	土壤亮度的 BSM 模型参数	0, 0.25, 0.5, 0.75
叶片光谱属性	Cab	叶绿素浓度	40, 60, 80

2.5.3 冠层水平三维荧光辐射传输模型 (DART) 模拟

为了研究农田“垄行”种植结构方式对农田冠层荧光逃逸概率的影响，本研究通过设置不同农田场景，使用 DART 模型进行模拟。DART 模型是一种三维辐射传输模型，其具有离散各向异性特性，并能够以逼真的方式描述植物结构，包括叶片分布和茎枝的几何形态 (Gastellu-Etchegorry et al., 1996)。最近，FLUSPECT 模型已整合到 DART 模型中，可用于模拟从叶片到冠层的荧光 (Gastellu-Etchegorry et al., 2017)，参数列表见表 2-11。此外，DART 还可模拟不同类型场景元素的光谱辐射预算，包括地面、木质元素和叶子的 3-D、2-D 和 1-D 辐射预算，以及用于表示叶子等场景元素的单个面的辐射预算。在辐射传输建模的不同阶段，这些预算可计算被拦截、散射、吸收和发射的辐射，以及用于模拟每个体素的每个面的辐照度和发射度。因此，DART 可计算每个叶片元素和每个体素以及冠层的光照条件和瞬时进入的 PAR 和 f_{APAR} 。冠层 SIF 逃逸概率 (f_{esc}) 定义为给定波长下由传感器观测到的离开冠层的 SIF (SIF_{obs}) 和整个冠层发射的总 SIF (SIF_{tot}) 之间的比值。其中， SIF_{obs} 是 TOC SIF 发射量，并对应于 DART TOC SIF 辐射

图像的角度积分, 有关 DART 荧光模拟过程可参考(Liu et al., 2019a)。SIF_{tot} 是在 3-D 植被冠层中由所有叶片在所有方向上发射的所有 SIF 光子的总和。DART 三维辐射预算可用于推导 SIF_{tot}, 其中包括从 3-D 植被冠层中每个叶片在所有方向上发射的 SIF。

表 2-11 DART 模型模拟参数列表
Table 2-11 Parameter list for DART model simulation

参数	描述	值	单位
Cab	叶绿素含量	40	$\mu\text{g cm}^{-2}$
Ccar	类胡萝卜素含量	10	$\mu\text{g cm}^{-2}$
Cdm	干物质含量	0.012	g cm^{-2}
Cant	花青素含量	0	$\mu\text{g cm}^{-2}$
Cw	叶片等效水层	0.009	cm
N	叶肉结构参数	1.4	-
Fqe1(PSI)	光系统 I 的荧光量子产量	0.002	-
Fqe2(PSII)	光系统 II 的荧光量子产量	0.01	-
SZA	太阳天顶角	25, 30, 35	Degree
VZA	观测天顶角	0, 5, 10	Degree
SAA	太阳方位角	225	Degree
VAA	观测方位角	180	Degree

本研究构建 5 m×5 m 的农田冠层场景, 包括不同垄行间距的玉米和大豆的场景模拟 (图 2-4)。玉米和大豆冠层高度分别为 2 m 和 0.7 m。由于玉米和大豆作物具有不同的冠层结构类型和管理模式, 对于玉米作物来说最为重要的是株距的设置, 而大豆作物则是行距, 因此本研究通过玉米冠层场景研究作物株距对荧光逃逸概率的影响; 通过大豆冠层场景研究作物行距对荧光逃逸概率的影响。其中玉米行距设置为 0.5 m, 三种株间距分别为 0.5 m ($\text{LAI} = 1.5 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$)、0.3 m ($\text{LAI} = 2.6 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$) 和 0.15 m ($\text{LAI} = 3.7 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$); 大豆作物株间距设置为 0.3 m, 行距分别设置为 0.5 m 和 1 m。太阳天顶角设置为 $30^\circ \pm 5^\circ$, 太阳方位角设置为固定值 225°; 观测天顶角设置为 $5^\circ \pm 5^\circ$, 观测方位角设置为固定值 180°。

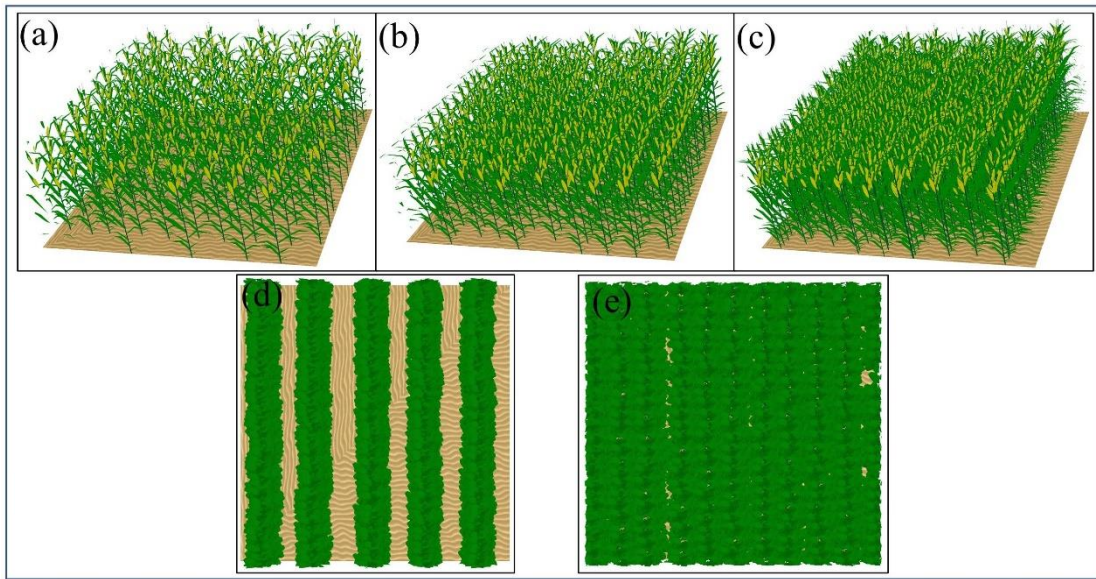


图 2-4 三维农田场景包含玉米和大豆，玉米：a、b、c 分别对应 0.5 m、0.3 m、0.15 m 株距，大豆：d 和 e 分别对应 1 m 和 0.5 m 行距。

Figure 2-4 Three-dimensional agricultural field scene including corn and soybeans. Corn: a, b, and c correspond to plant spacing of 0.5 m, 0.3 m, and 0.15 m, respectively. Soybeans: d and e correspond to row spacing of 1 m and 0.5 m, respectively.

第三章 光系统荧光激发谱重构及荧光激发效率的分离

由于叶片荧光模型 FLUSPECT 的荧光激发谱和荧光激发效率参数决定了模拟的叶片叶绿素荧光光谱谱形和大小，本章研究内容聚焦光系统水平荧光激发谱的构建以及光系统 I 和光系统 II 荧光激发效率的分离，以提高 FLUSPECT 模型的光谱模拟能力。基于多种环境条件下的叶片的上下行全波段荧光光谱和同步测量的调制叶绿素荧光（PAM）数据，本研究首先通过 FLUSPECT 模型反演的方法，从而获得光系统水平的荧光激发谱和光系统总荧光激发效率。然后采用奇异值分解（SVD）方法和线性回归方法进行荧光激发谱的重构以及光系统荧光激发效率的分离。最后使用重构的荧光激发谱替换 FLUSPECT 模型中默认的荧光激发谱，用于不同环境下叶片荧光光谱的模拟测试以评估荧光激发谱重构方法的有效性。本研究所提出的方法有助于从机理上改进叶片荧光模型在不同环境下对叶片全波段荧光光谱模拟的准确性。

3.1 FLUSPECT 反演结果与默认参数比较

本研究使用了不同光强梯度下的叶片上行和下行荧光光谱数据，通过 FLUSPECT 模型反演得到荧光激发谱和荧光激发效率（ F_{qe} ）。结果显示，反演的荧光激发谱与默认激发谱之间的差异较小（图 3-1a）。与默认激发谱相比，反演的荧光激发谱的中谷位置偏向蓝光波段，而近红外峰则有些高（图 3-1a）。在不同的光照条件下， F_{qe} 是一个可变的值，而不是一个固定的值（图 3-1b）。在较低的光条件下（ $PAR < 500 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ）， F_{qe} 迅速增加（图 3-1b）。然而，当 PAR 较高时， F_{qe} 与 PAR 呈负相关（图 3-1b），这主要是由于高光下 NPQ 的增加使得荧光产率下降，随着 PAR 增加，NPQ 增加并占主导地位。结果表明基于 FLUSPECT 反演方法可以成功获得荧光激发谱和 F_{qe} 参数。

本研究发现，使用默认荧光激发谱模拟的荧光和实际测量的叶绿素荧光光谱确实存在一些明显的系统性差异，尤其是在红色峰值处（图 3-2a, c）。经过校准荧光激发谱，模拟的性能可以得到明显改善（图 3-2b, d）。观测和测量荧光光谱之间的良好匹配表明，校准后的荧光激发谱适用于叶片水平上的全波段荧光光谱模拟（图 3-2b, d）。在不同光照条件下，模拟与测量的上行荧光光谱（图 3-2b）和下行荧光光谱（图 3-2d）的 R^2 均为 1.00，RMSE 小于 0.05。这说明校准后的荧光激发谱明显提高了模拟与测量叶片荧光光谱之间的匹配程度。

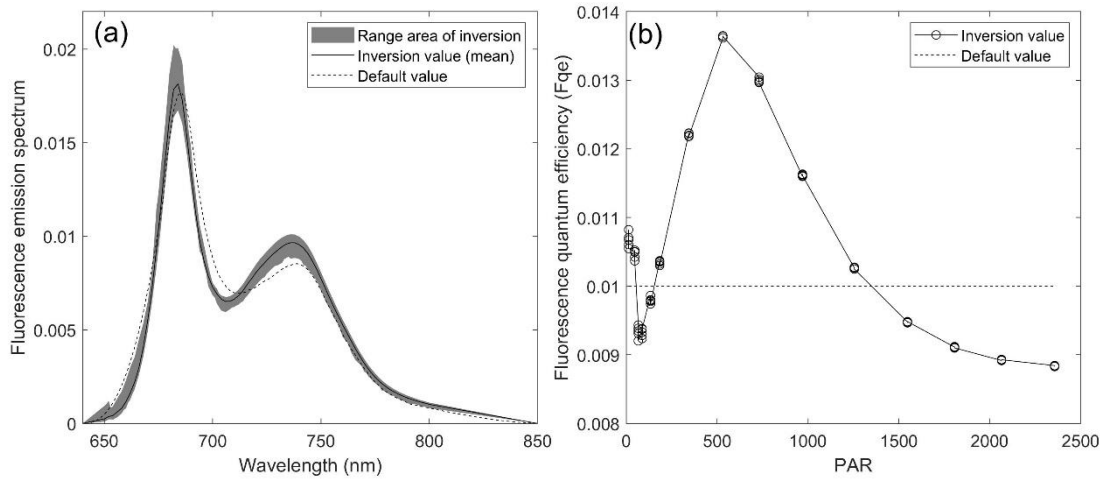


图 3-1 比较不同光条件下 FLUSPECT 反演的荧光激发谱 (a) 和荧光量子产量 (b) 与对应的默认值。

Figure 3-1 The calibrated fluorescence emission spectrum (a) and fluorescence quantum efficiency (b) in comparison with the default counterparts used in the FLUSPECT under different light conditions.

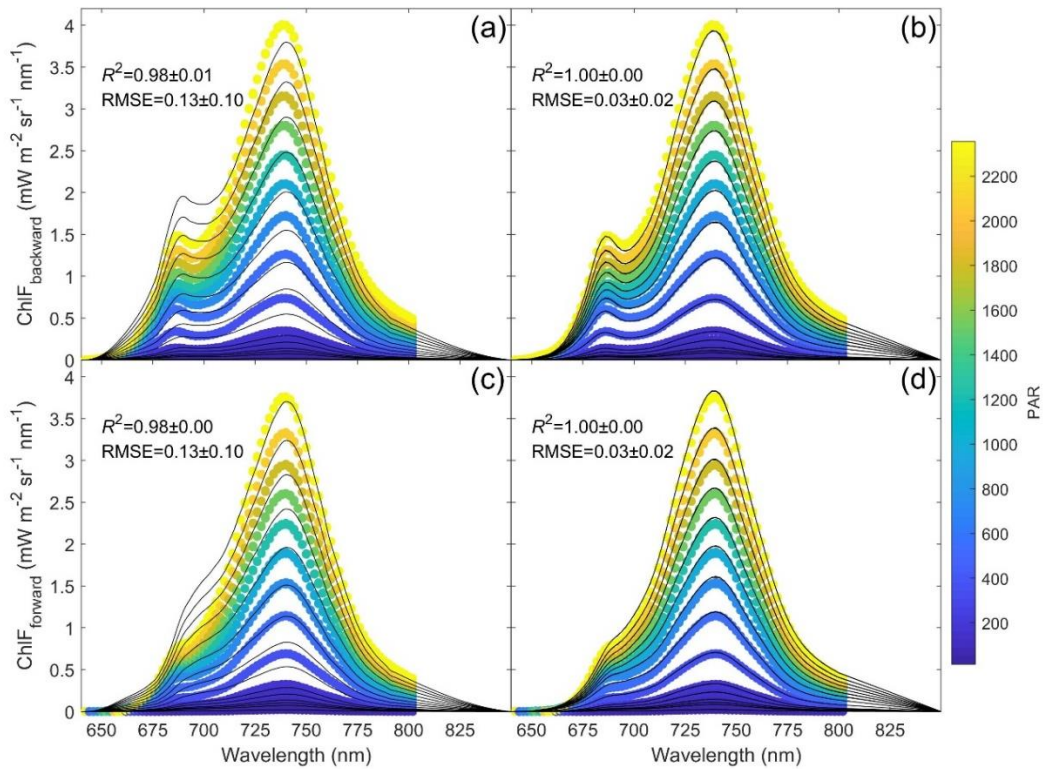


图 3-2 不同光照条件下测量的叶绿素荧光光谱 (ChlF 彩色圆圈) 与默认参数 (a、c) 或反演方法 (b、d) 下模拟的叶绿素荧光光谱 (黑色实线) 的比较。(a、b) 上行荧光光谱; (c、d) 下行荧光光谱。图中圆圈颜色表示光合有效辐射 (PAR, $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) 大小。

Figure 3-2 Comparison between measured ChlF spectra (color circles) and simulated ChlF spectra (black solid lines) with default parameters (a, c) or with inversion approach (b, d) under different light conditions. (a, b) The backward fluorescence spectra; (c, d) The forward fluorescence spectra. The color ramp indicates incident photosynthetically active radiation (PAR, $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$).

3.2 荧光激发谱的分解结果

本研究发现荧光激发谱的形状在不同的光条件下有所变化，因此本研究使用 SVD 分解方法来解释导致荧光激发谱变化的主要生理因素。结果显示前三个主要的主成分包含了控制光谱形状的大部分信息，可以解释 94.4% 的方差（图 3-3）。第一个主成分（PC1）（图 3-3a）、第二个主成分（PC2）（图 3-3c）和第三个主成分（PC3）（图 3-3e）分别解释了 87%、5.1% 和 1% 的方差。此外，本研究发现 PC1 样本权重和 PC2 样本权重之间存在强线性关系（ $R^2 = 0.9$ ）（图 3-3b），PC2 样本权重和热耗散（NPQ）之间存在明显的非线性关系（ $R^2 = 0.76$ ）（图 3-3d），以及 PC3 样本权重和光合 CO_2 同化速率（A）之间存在显著线性关系（ $R^2 = 0.78$ ）（图 3-3f）。

通过将主成分光谱进行叠加，可以显示出不同主成分光谱控制荧光激发谱的谱形的位置信息（图 3-4）。首先，PC1 表征了荧光激发谱的主要光谱曲线形式。其次，PC2 调整了激发谱的两个峰值差异，其主要是由于 NPQ 的变化引起的。最后，PC3 控制了两个峰之间波谷的变化，本研究将其归因于光合 CO_2 同化速率的变化。因此，在不同光条件下进行荧光激发谱重构时应考虑前三个主成分以及 NPQ 和 A 的贡献。由图 3-3 可知样本权重与 NPQ 和 A 的关系公式如下：

$$u_1 = 0.012u_2 + 0.038 \quad (3-1)$$

$$u_2 = 0.021\text{NPQ}^2 - 0.114\text{NPQ} + 0.111 \quad (3-2)$$

$$u_3 = 0.003A + 0.039 \quad (3-3)$$

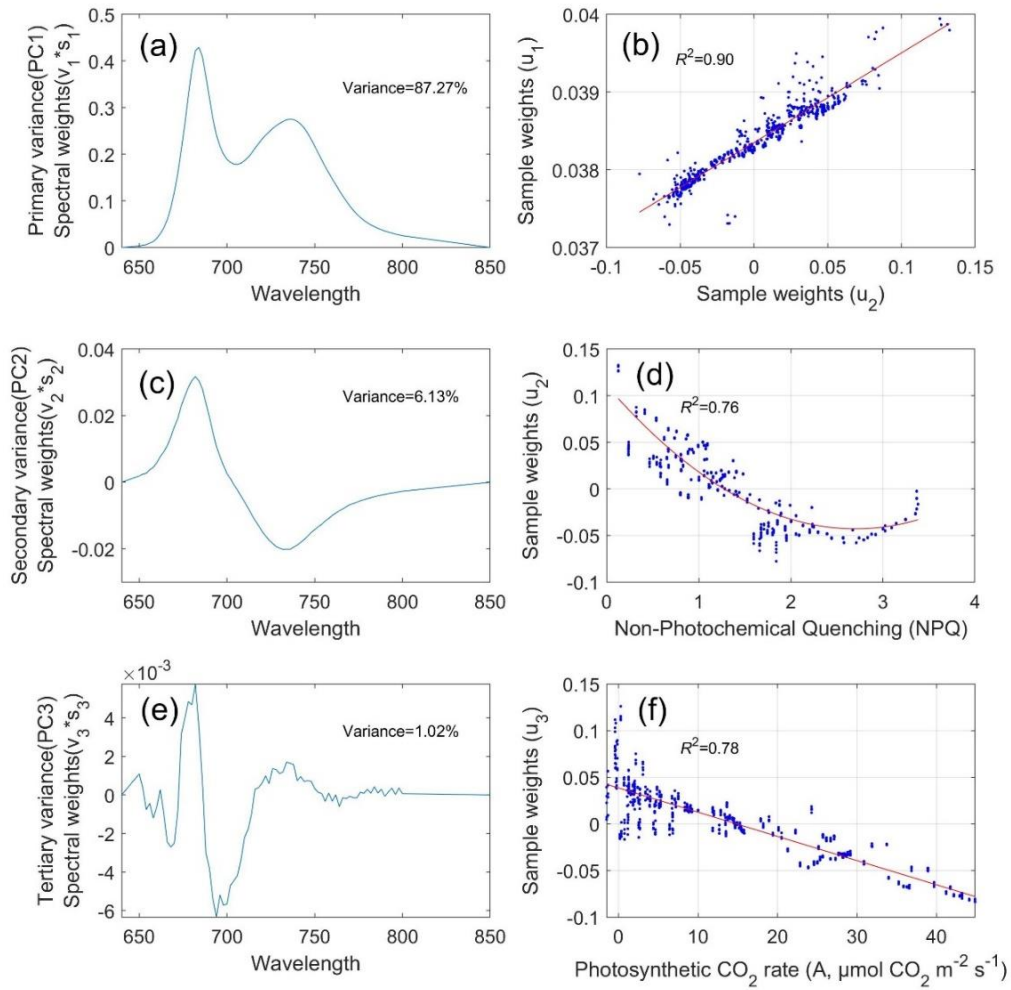


图 3-3 荧光激发谱 PC1(a)、PC2(c)和 3PC(e)的光谱变化。各主成分的总方差解释在子图中显示。PCn 样品权重 (Sample weights) 与经验变量相对应, 以指示每个样本对主成分光谱形状和振幅的相对影响, 其中: (b) 样品权重 (u_2); (d) 非光化学淬灭 (NPQ); (f) 光合 CO_2 同化速率 ($A, \mu\text{mol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$)。在 (b) 和 (f) 中, 使用线性最小二乘法拟合数据, 在 (d) 中使用二次多项式拟合。PC 表示主成分。

Figure 3-3 Spectral variance of the fluorescence emission spectrum with PCs 1 (a), 2 (c), and 3 (e) respectively. Each PC's total explained variance is shown in the subplot text. PC_n sample weights are shown against empirical variables to indicate the relative effect each sample has on the direction and amplitude of the PC_n spectral shape, and: (b) Sample weights (u_2); (d) Non-photochemical quenching (NPQ); (f) Photosynthetic CO_2 rate ($A, \mu\text{mol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$). In (b) and (f), linear least squares are fit to the data, and a second-order polynomial fit in (d). PC = principal component.

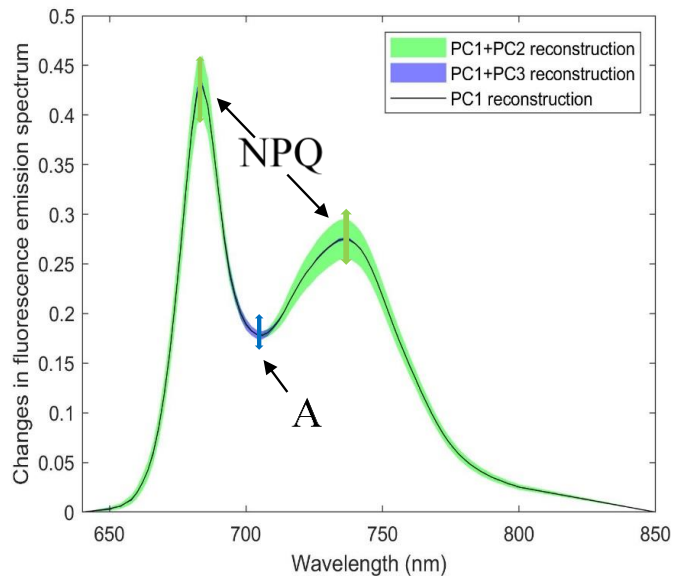


图 3-4 与 PC1、PC2 和 PC3 相关的荧光激发谱变化的总结。PC1 代表均值发射光谱形状（实线），PC2 代表非光化学淬灭（NPQ，绿色）的光谱变化，PC3 代表光合 CO₂ 速率（A，蓝色）的光谱变化。PC = 主成分。

Figure 3-4 Summary of changes in the fluorescence emission spectrum associated with PC1, PC2, and PC3. PC1 represents the mean emission spectral shape (the solid line), PC2 represents the spectral changes in non-photochemical quenching (NPQ, green), and PC3 represents the spectral changes in photosynthetic CO₂ rate (A, blue). PC = principal component.

3.3 荧光激发谱重构方法验证

在本节中，荧光激发谱主要是通过公式（3-1）、（3-2）和（3-3）以及主成分光谱 PC1、PC2 和 PC3 进行重构。将重构的荧光激发谱替换 FLUSPECT 中默认荧光激发谱进行模拟，然后与实测上行和下行荧光光谱进行对比，用以验证荧光激发谱重构方法的可靠性。图 3-5 显示上行荧光光谱模拟结果：随着光强的增加，测量和模拟荧光光谱均显著增加，其中基于荧光激发谱重构方法（ R^2 介于 0.99~1）与实测光谱更为一致，相比默认荧光激发谱方法模拟的荧光光谱（ R^2 介于 0.94~0.98），并且显著提高了模拟荧光光谱的准确度（RRMSE<12% vs. RRMSE<29%）。尽管在低光（PAR < 160 $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ）下，重构方法模拟的荧光光谱误差略微偏高，RRMSE>9%，但是在高光强下（PAR > 1200 $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ），重构方法能精准模拟荧光光谱，RRMSE<5%。重构方法对下行叶绿素荧光光谱模拟也有类似结果（图 3-6）。因此，在不同光照强度下，基于重构方法可以提高 FLUSPECT 模型对叶绿素荧光光谱的模拟能力。

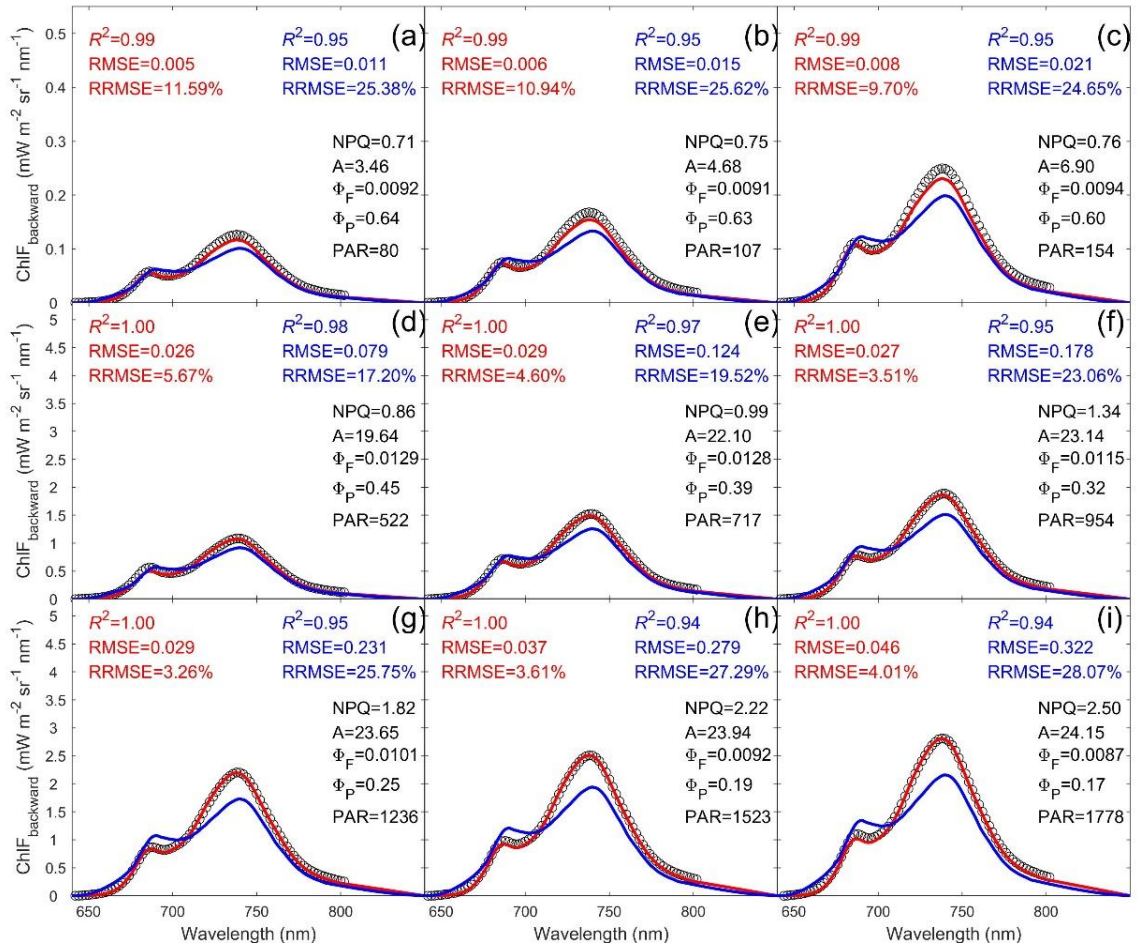


图 3-5 实测上行叶绿素荧光光谱 ($\text{ChlF}_{\text{backward}}$, 黑色圆圈)、使用激发谱重构方法模拟的上行叶绿素荧光光谱 (红色线) 与使用默认荧光激发谱模拟的上行叶绿素荧光光谱 (蓝色线) 在不同 PAR 条件下的差异比较 (低: a-c, 中等: d-f, 高: g-i)。生理参数在图中被标记: 非光化学淬灭 (NPQ)、光合 CO_2 速率 (A)、荧光量子产量 (Φ_F) 和光化学量子产量 (Φ_P)。

Figure 3-5 Comparison between the measured backward ChlF ($\text{ChlF}_{\text{backward}}$, black circles) and simulated backward ChlF with the reconstruction method (red lines) versus the counterparts (blue lines) used in the FLUSPECT model under different PAR conditions (low: a-c, middle: d-f, high: g-i). Some key parameters are labeled in the subplots, i.e. non-photochemical quenching (NPQ), photosynthetic CO_2 rate (A), fluorescence quantum yield (Φ_F) and photochemical quantum yield (Φ_P).

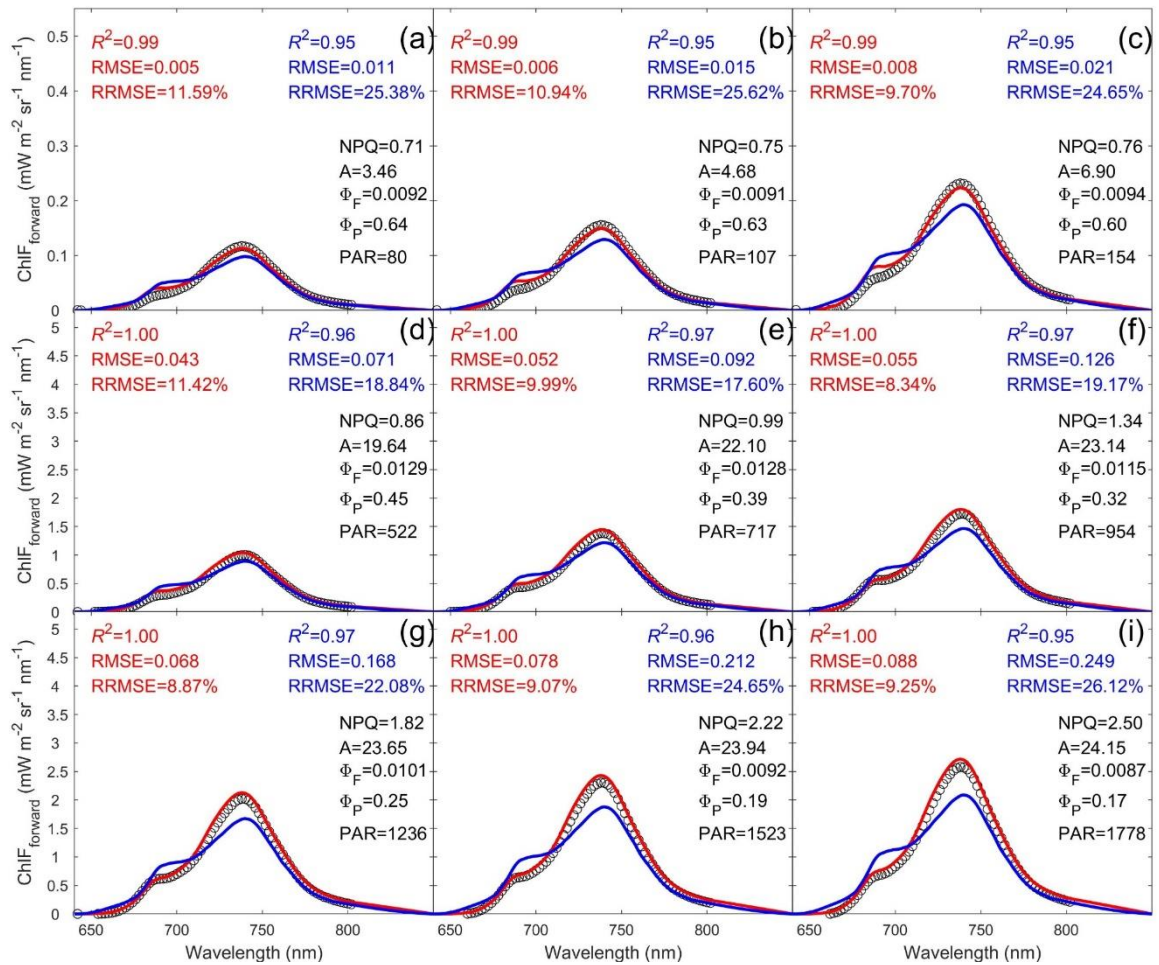


图 3-6 实测下行叶绿素荧光光谱 ($\text{ChlF}_{\text{forward}}$, 黑色圆圈)、使用激发谱重构方法模拟的下行叶绿素荧光光谱 (红色线) 与使用默认荧光激发谱模拟的下行叶绿素荧光光谱 (蓝色线) 在不同 PAR 条件下的差异比较 (低: a-c, 中等: d-f, 高: g-i)。生理参数在图中被标记: 非光化学淬灭 (NPQ)、光合 CO_2 速率 (A)、荧光量子产量 (Φ_F) 和光化学量子产量 (Φ_P)。

Figure 3-6 Comparison between the measured forward ChlF ($\text{ChlF}_{\text{forward}}$, black circles) and simulated forward ChlF with the reconstruction method (red lines) versus the counterparts (blue lines) used in the FLUSPECT model under different PAR conditions (low: a-c, middle: d-f, high: g-i). Some key parameters are labeled in the subplots, i.e. non-photochemical quenching (NPQ), photosynthetic CO_2 rate (A), fluorescence yield (Φ_F) and photochemical yield (Φ_P).

由于在光强变化下, PAR 是驱动叶绿素荧光强度变化的主要原因, 因此模拟和观测的荧光光谱一致性都比较高, 有可能是由于相同的 PAR 驱动的原因。为了进一步检验荧光激发谱重构方法在非 PAR 变化环境条件下对叶片荧光光谱模拟的准确性, 本研究利用温度和 CO_2 混合环境条件下获得的 NPQ 和 A 参数重构荧光激发谱, 并进行 FLUSEPCT 模拟。混合环境条件下设置叶片温度为 15°C 、 25°C 和 35°C 和 CO_2 浓度为 300ppm、400ppm 和 500ppm, 因此共有 9 个环境变量组合, 本研究选择 3 个光强大小分别是低光强 ($\text{PAR}=107 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$)、中等光强 ($\text{PAR}=717 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$)、高光强

($\text{PAR}=1523 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), 进行叶绿素光谱关键位置(红峰, 中谷, 远红峰)的模拟值和测量值的比较。表 3-1 总结了重构方法在混合环境条件下对叶绿素荧光光谱关键位置的预测能力。结果显示重构方法对荧光光谱关键位置模拟的准确性明显高于默认荧光激发谱方法。基于重构方法对上下行荧光光谱关键位置模拟的 R^2 范围是 0.83-1.00, 而基于默认荧光激发谱的 R^2 范围是 0.3-0.99 (表 3-1)。在低光强下, 尽管使用默认方法模拟的 R^2 与重构方法相似, 但是默认方法 (RRMSE 介于 12.26%~47.12%) 模拟误差明显高于重构方法 (RRMSE 介于 4.10%~20.04%) (表 3-1)。在中等光强下, 重构方法明显改善了上下行荧光光谱的远红峰的模拟效果, 相比默认方法 R^2 提高了 133%, RRMSE 降低 81.7% (表 3-1)。在高光强下, 重构方法对上下行荧光峰值和谷值模拟均较为准确, R^2 平均为 0.96, RRMSE 平均为 8%, 而默认方法 R^2 平均为 0.83, RRMSE 平均为 27.6% (表 3-1)。因此通过将生理信息 (NPQ、A) 融入到荧光激发谱中, 可以显著改善模拟叶绿素荧光光谱对温度和 CO_2 的响应, 尤其是在中高等光强下。总的来说, FLUSPECT 模型中使用的重构荧光激发谱有助于提高环境因素 (如温度和 CO_2) 诱导的荧光光谱变化的模拟能力。

表 3-1 在温度/CO₂ 混合环境下比较了测量的红峰、中间谷和远红峰的 ChlF 值与通过默认方法和重构方法模拟得到的值。比较 R^2 、RMSE ($\text{mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$) 和 RRMSE (%) 等方面的模拟精度。

Table 3-1 Comparison between the measured ChlF values at red peak, mid-valley and far-red peak and the counterparts simulated by the default and the reconstruction method under mixed environment conditions (leaf temperature: 15°C, 25°C, 35 °C; CO₂: 300ppm, 400ppm, 500ppm). The simulation accuracy in terms of R^2 , RMSE ($\text{mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$) and RRMSE (%) are reported.

PAR	荧光方向	光谱位置	默认荧光激发谱			重构荧光激发谱		
			R^2	RMSE	RRMSE (%)	R^2	RMSE	RRMSE (%)
低	上行	红峰	0.94	0.06	12.26	0.97	0.05	9.46
		中谷	0.97	0.08	18.41	0.98	0.04	9.98
		远红峰	0.99	0.20	18.77	1.00	0.04	4.10
	下行	红峰	0.91	0.10	38.15	0.83	0.05	20.04
		中谷	0.99	0.13	47.12	0.98	0.04	15.06
		远红峰	0.98	0.16	16.60	0.99	0.04	4.53
中	上行	红峰	0.83	0.17	15.90	0.96	0.05	4.36
		中谷	0.83	0.21	20.98	0.98	0.07	7.29
		远红峰	0.30	0.58	22.35	0.86	0.13	4.84
	下行	红峰	0.83	0.23	35.91	0.94	0.09	13.82
		中谷	0.79	0.32	46.95	0.95	0.09	13.32
		远红峰	0.54	0.40	17.20	0.97	0.06	2.57
高	上行	红峰	0.81	0.20	16.73	0.95	0.06	4.71
		中谷	0.81	0.24	21.64	0.98	0.08	7.37
		远红峰	0.76	0.68	23.05	0.94	0.14	4.89
	下行	红峰	0.90	0.27	38.09	0.94	0.10	14.59
		中谷	0.85	0.37	48.66	0.96	0.10	13.81
		远红峰	0.82	0.47	17.71	0.98	0.07	2.83

3.4 光系统 I 和光系统 II 荧光激发效率变化

基于 FLUSPECT 模型反演得到光系统总荧光激发效率 (Φ_F)，根据 PAM 测量的 PSII 荧光量子产量 ($\Phi_{F_PSII_PAM}$)，通过对比两者之间的关系，发现 Φ_F 和 $\Phi_{F_PSII_PAM}$ 明显线性相关 $R^2 = 0.94$ (图 3-7 a)， Φ_F 和 $\Phi_{F_PSII_PAM}$ 线性回归方程的斜率和截距分别为 0.87 和 0.004，其中 0.87 可作为 $\Phi_{F_PSII_PAM}$ 与 Φ_{F_PSII} 的转化系数。图 3-7b 结果显示，当 $\text{PAR} < 500 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ 时，随着光强的增加， Φ_F 和 Φ_{F_PSII} 逐渐增加。而 $\text{PAR} > 500 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ 时， Φ_F 和 Φ_{F_PSII} 随着光强的增加而减少，并在高光强下趋于稳定。而 Φ_{F_PSI} 随光强变化较弱，其范围是 0.003 到 0.004，在中等光强下 ($\text{PAR} = 1250 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ 左右)， Φ_{F_PSI} 达到最高值 (图 3-7b)。通过对 Φ_{F_PSII} 和 Φ_{F_PSI} 比值分析可知，当光强接近

600 $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ 时, $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 和 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 比值达到最大值 3.4, 之后随着光强的增加 $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 和 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 比值迅速降低, 当光强超过 1250 $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ 时, $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 和 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 比值较为稳定接近 2 (图 3-7b)。由此可见, 在短期光强变化下, $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 变化与 Φ_{F} 变化趋势接近一致, 在强光下 $\Phi_{\text{F_PSII}}$ 降到最低, 而 $\Phi_{\text{F_PSI}}$ 随光强变化变化不明显, 值较为稳定。

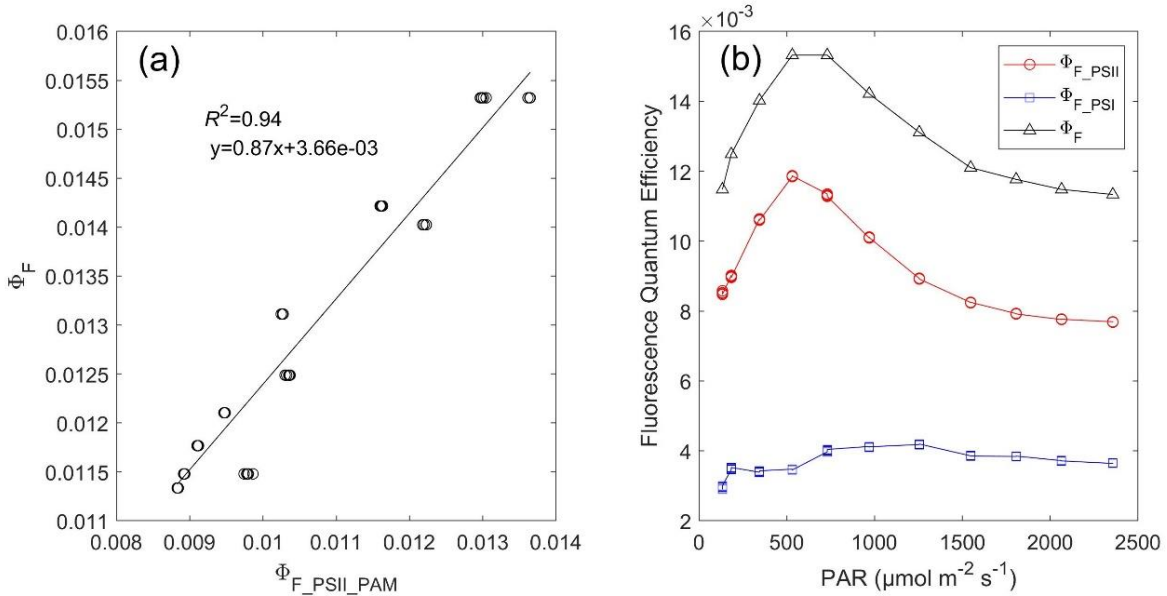


图 3-7 (a) 总荧光激发效率(Φ_{F})与 PAM 测量的 PSII 荧光量子产量($\Phi_{\text{F_PSII_PAM}}$)之间的比较; (b) 不同光强下 PSII 荧光量子产量(红色圆圈, $\Phi_{\text{F_PSII}}$) 和 PSI 荧光量子产量 (蓝色方块, $\Phi_{\text{F_PSI}}$) 的分离。

Figure 3-7 (a) Comparison between the total fluorescence quantum efficiency (Φ_{F}) and fluorescence quantum efficiency of PSII measured by PAM ($\Phi_{\text{F_PSII_PAM}}$); (b) Separation of the fluorescence quantum efficiency of PSII (red circles, $\Phi_{\text{F_PSII}}$) and PSI (blue squares, $\Phi_{\text{F_PSI}}$) in response to light.

3.5 讨论

为了提高 FLUSPECT 模型对叶片叶绿素荧光光谱的模拟能力, 可以从荧光激发谱和激发效率进行参数校准。如有些研究表明叶绿素荧光光谱双峰相对大小变化可能与 PSI 和 PSII 的荧光激发效率的变化相关。Zou and Zhang (2020)通过反演 FLUSPECT 的 Fqe1 和 Fqe2 参数同样可以很好的模拟自然条件下玉米和大豆叶片的全波段荧光光谱。而 van der Tol 等(2019)利用 SCOPE 的“RTMF”模块 (FLUSPECT) 单独重新校准荧光激发谱, 实现了对大豆冠层不同部位的叶子的上下行全波段荧光光谱的精确模拟。本研究通过同时进行荧光激发效率和荧光激发谱的反演, 对玉米叶片上下行荧光光谱模拟取得了很好的模拟效果, R^2 接近 1, 并且通过 SVD 对不同光强梯度下荧光激发谱形状进行主成分分解, 证明光合生理因素 (如 NPQ 和 A) 对叶绿素荧光激发谱的峰谷大小

有着重要影响。为了改善 FLUSPECT 模型对叶绿素荧光光谱的模拟能力,本研究通过通过 NPQ 和 A 等生理参数重构荧光激发谱,带入到 FLUSPECT 模型中进行模拟,无需通过实测光谱的反演,在不同光强、温度和 CO₂ 环境下,成功模拟了上下行荧光的峰谷位置随环境因素的变化,从而验证了荧光激发谱重构方法的可靠性。相比于传统固定荧光激发谱而只改变荧光激发效率的方法,基于重构的荧光激发谱对不同环境下叶片全波段荧光模拟更为机理性以及实用性较强。与 van der Tol 等(2019)基于大豆叶片反演的荧光激发谱相比,本研究通过玉米叶片反演得到的荧光激发谱略显蓝移。本研究提出的荧光激发谱重构的方法,有助于提高叶片荧光模型荧光全波段模拟的准确性,但是还需要进一步研究不同物种和环境条件下叶片荧光光谱响应过程以及改进目前荧光模型的荧光激发模块,以验证荧光激发谱重构方法的准确性和普适性。

3.6 小结

本章研究主要基于全波段荧光光谱和 PAM 荧光同步测量数据,利用 FLUSPECT 模型反演方法,进行了光系统荧光激发谱的构建以及 PSI 和 PSII 荧光激发效率的分离。研究表明:重构的荧光激发谱波峰比例以及波谷位置主要受到 NPQ 和 A 的控制。在不同 PAR 梯度以及温度和 CO₂ 混合环境下,采用重构的荧光激发谱的 FLUSPECT 模型能够准确模拟下行与上行叶绿素荧光光谱波峰和波谷的大小以及变化趋势。基于 FLUSPECT 模型反演和 PAM PSII 荧光测量数据,成功分离了 PSI 和 PSII 荧光激发效率,在短期光照强度变化下,PSI 荧光激发效率变化不明显,而 PSII 荧光激发效率在弱光下达到最高值,之后随着光强的增加而降低。在强光下 PSI 荧光激发效率对总荧光激发效率贡献比较大达到 1/3。本研究通过荧光激发谱重构和 PSI 和 PSII 荧光激发效率分离为光系统荧光机理建模提供理论基础。

第四章 提高干旱胁迫下叶片叶绿素荧光与光合线性关系

由于在干旱胁迫下，冠层观测的 SIF 和 GPP 的线性关系下降，这说明在胁迫条件下直接利用 SIF 的线性模型进行 GPP 估算能力会降低，导致其下降的原因有冠层结构因素和叶片生理因素，本研究将从叶片尺度阐明干旱胁迫下叶绿素荧光和光合响应机理联系。本章研究目标有两个：首先，了解不同干旱胁迫程度对叶绿素荧光参数和气体交换参数的影响，特别是荧光量子产量和光化学量子产量在干旱胁迫下能量分配的不同。其次，探索相关生理参数直接约束叶绿素荧光以提高干旱胁迫下光合估算的方法，这对光合-荧光在胁迫环境下机理建模至关重要。为此，本研究使用叶片荧光-光合-热耗散同步测量设备，对持续干旱处理的玉米进行了光合与荧光等生理相关参数的同步测量，以解析干旱胁迫下荧光与光合的生理响应机制。

4.1 干旱胁迫对气体交换参数及荧光参数的影响

在不同干旱胁迫下，气体交换参数、PAM 荧光参数和叶绿素荧光光谱参数均会发生变化（图 4-1）。气体交换参数是指在植物叶片和气体环境之间进行的物质交换的参数。这些参数包括净光合速率 A 、蒸腾速率 E 、胞间二氧化碳浓度 C_i 、气孔导度 g_{sw} 等。PAM 荧光参数是利用调制叶绿素荧光仪(PAM)获得的一系列参数，可以反映植物叶片光合过程中光能的利用效率和光反应中心的活性。这些参数包括非光化学淬灭(NPQ)、最大光化学量子产量 (F_v/F_m)、电子传递速率 (ETR)、PSII 反应中心开放程度 (q_L) 等。叶绿素荧光光谱参数是指通过光谱仪获得的一系列荧光光谱曲线参数，这些参数包括叶绿素荧光红光波段发射峰 ($ChlF_{686}$)、叶绿素荧光远红光波段发射峰 ($ChlF_{740}$)、消除 PAR 影响的表观荧光产率 (F_{yfield}) 以及荧光比值 ($ChlF_{686}/ChlF_{740}$) 等。如图 4-1a-d 所示气体交换参数的变化：随着干旱程度的加剧，植物叶片的 A 会逐渐降低， E 和 g_{sw} 也会下降，导致植物对 CO_2 和水分的吸收和释放速率降低。同时，在严重干旱胁迫下 C_i 会增加。PAM 荧光参数的变化（图 4-1e-h）：随着干旱程度增加，NPQ 逐渐上升，在严重干旱胁迫时 NPQ 达到饱和。此外， q_L 和 ETR 也会下降，表明植物叶片光系统电子传递速率下降。在严重干旱胁迫下，植物叶片 F_v/F_m 会下降，反映出光反应中心的活性降低。叶绿素荧光光谱参数的变化（图 4-1i-l）：在干旱胁迫下， $ChlF_{686}$ 和 $ChlF_{740}$ 均没有明显下降，然而随着光强的降低的 $ChlF_{686}$ 和 $ChlF_{740}$ 明显减少，这说明 PAR 是叶绿素荧光的主要驱动因素。 $F_{yfield740}$ 随着干旱程度加剧会下移，反映出荧光激发效率在光合过程中会对干旱胁迫发生响应。同时， $ChlF_{686}$ 和 $ChlF_{740}$ 荧光比例 ($ChlF_{686}/ChlF_{740}$) 在严重干旱下上升，表明植物叶片中的光合色素分子受到抑制，叶绿素含量下降。总

之，不同干旱胁迫下，植物的气体交换参数、PAM 荧光参数和叶绿素荧光光谱参数均会发生变化，这些参数的变化反映了植物对干旱胁迫的适应和响应能力。

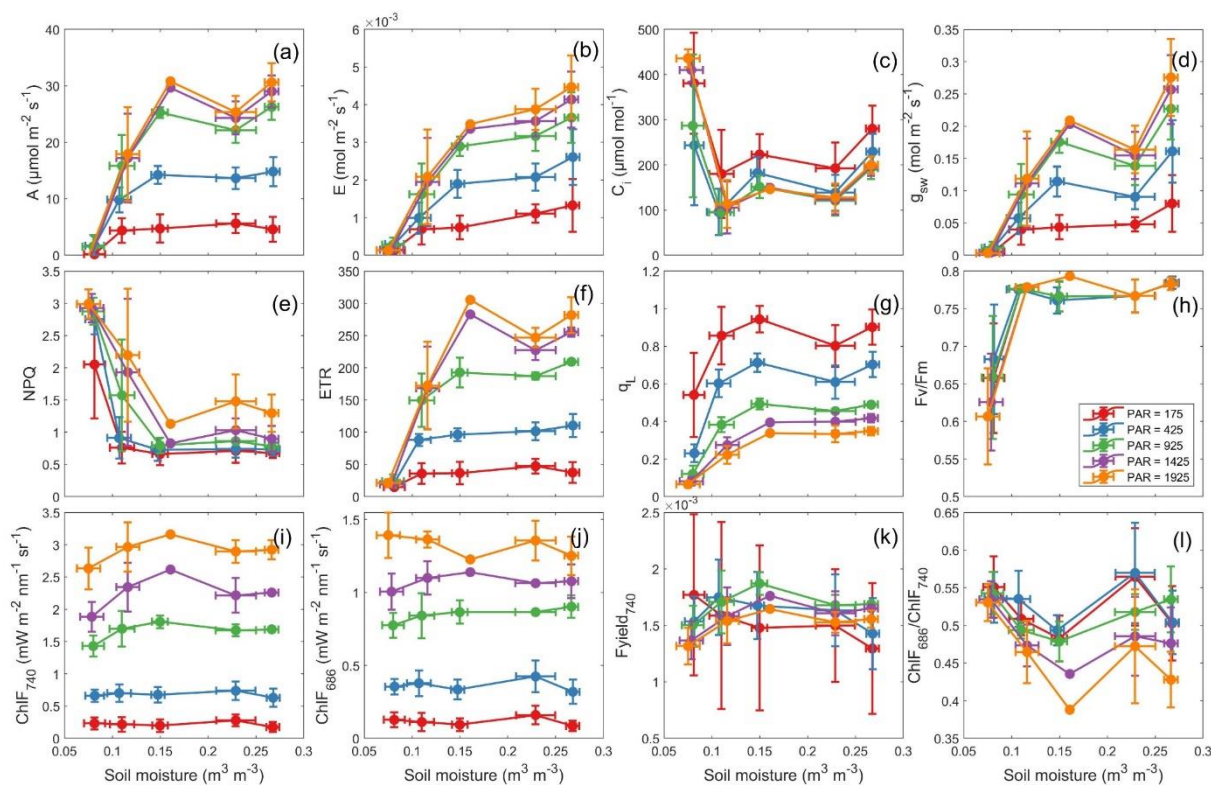


图 4-1 不同干旱胁迫下叶片光合生理与荧光参数的变化

Figure 4-1 Changes in leaf photosynthetic physiology and fluorescence parameters under different drought stresses

在干旱胁迫下上行荧光光谱的两个峰的光谱位置由于叶绿素含量的降低和土壤含水量的变化而发生偏移(图 4-2)。结果显示:当叶绿素含量降低时,远红外峰位置($POS_{Far-red}$)会发生明显的蓝移,从高叶绿素浓度下的 741nm 到低叶绿素浓度下的 735nm (图 4-2b);而红峰位置(POS_{Red})却没有发生明显变化,在 687.5nm 与 684.5nm 之间浮动(图 4-2a)。结果还显示 $POS_{Far-red}$ 对土壤含水量也有不同的响应,在土壤含水量较低时(介于 0.1-0.15), $POS_{Far-red}$ 变化范围最大(接近 6 nm),而在严重干旱情况下(土壤含水量低于 0.1 时), $POS_{Far-red}$ 会集中向远红光波段偏移(图 4-2d)。 POS_{Red} 随着土壤含水量的降低而略偏向蓝移(图 4-2c)。不同光强大小也会影响两个峰的位置,大多数情况是在强光下,两个峰的位置更偏向红移。由此可见,叶绿素浓度、土壤含水量、光照强度都会对叶绿素荧光峰值的位置有所影响,其中叶绿素含量对 $POS_{Far-red}$ 的影响最大。

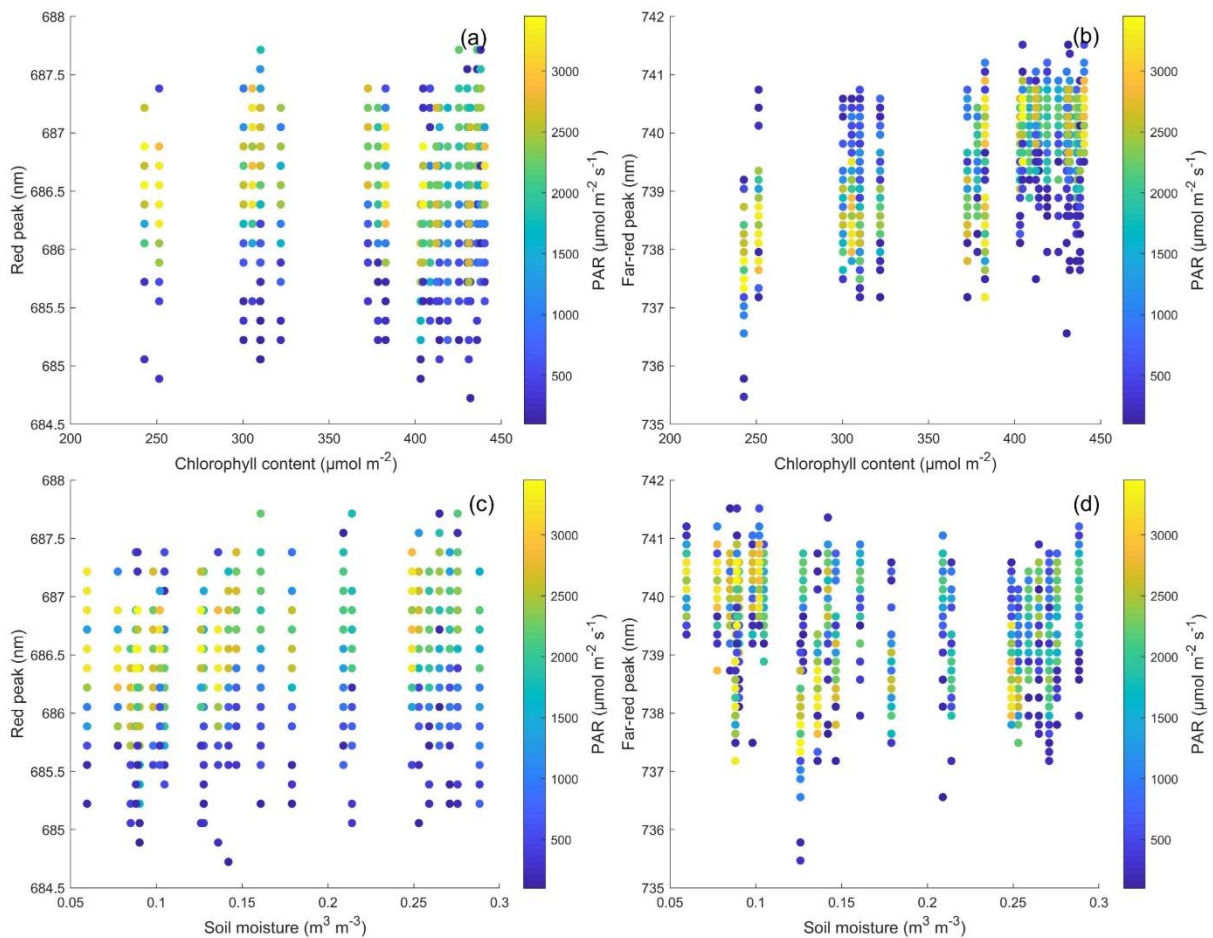


图 4-2 不同光强下叶片叶绿素荧光光谱峰值位置随叶绿素浓度和土壤含水量的变化
 Figure 4-2 Changes in peak position of leaf chlorophyll fluorescence spectra under different light intensities as affected by chlorophyll concentration and soil moisture

4.2 干旱胁迫下光系统能量分配的变化

不同光强强度和干旱胁迫条件下，光系统 II (PSII) 能量分配比例也会发生明显变化 (图 4-3)。结果显示：在高光强下，干旱胁迫会导致 PSII 中光化学反应和非光化学反应之间的能量分配比例发生变化，其中：轻度干旱胁迫时 (土壤含水量介于 15%-20%)，PSII 的能量分配比例没有明显变化， Φ_P 保持稳定 (图 4-3a)。在这种情况下，光合作用能力没有显著下降。中度干旱胁迫 (土壤含水量介于 10%-15%)：此时，PSII 的能量分配比例会发生变化， Φ_{NPQ} 增加，而 Φ_P 下降，光合作用能力下降 (图 4-3a)。在这种情况下，植物会采取一些适应策略，如增加保护性色素和抗氧化剂的合成，来应对干旱胁迫。重度干旱胁迫 (土壤含水量介于 5%-10%)：此时， Φ_{NPQ} 显著增加，而 Φ_P 显著下降，能量分配比例明显偏向于热耗散，光合作用能力大幅度下降 (图 4-3a)。在这种情况下，植物会出现严重的光合作用受损和细胞膜的氧化损伤等现象，甚至可能导致植

物死亡。在低光强条件下， Φ_P 明显提高（图 4-3b），这可能是由于低光强下植物更有效地利用了光能量进行光合作用，因此增加了 Φ_P ，其对于干旱程度响应阈值相比高光下有所降低。随着干旱程度的增加， Φ_F 在高光强下也存在阈值，当土壤含水量低于 15% 时， Φ_F 明显下降（图 4-3a），而在低光强下， Φ_F 在严重干旱胁迫下甚至有所上升（图 4-3b），这是由于低光下光合作用光子供应较少，PSII 中的电子传递速率相对较慢，NPQ 耗散能量尽管有所增加但是相比高光下增加幅度明显降低，因此被迫通过荧光释放来耗散多余的能量。研究结果还表明， Φ_D 和 Φ_N 在 PSII 的分配比例可以根据光照条件和叶片的生理状态而变化。在未受到干旱胁迫下， Φ_N 的比例较低， Φ_N 占总热耗散的比例约为 20-30%，而 Φ_D 的比例较高，占总热耗散的比例约为 70-80%。但是在光合作用受到干旱胁迫时， Φ_N 的比例会增加，以避免过量的光能造成光氧化和光损伤。总之，干旱胁迫对植物的 PSII 能量分配有着重要的影响，不同的光照条件下植物的光合作用和保护机制有所不同。

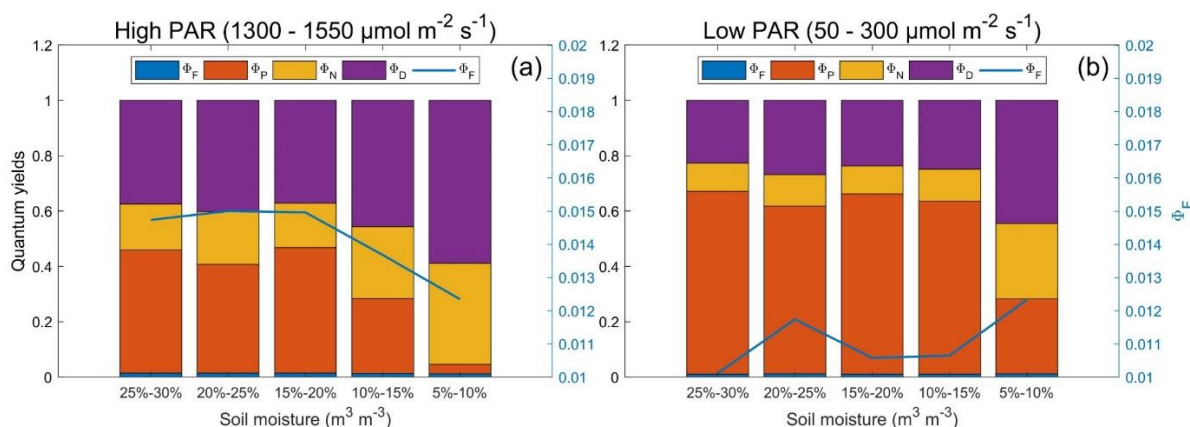


图 4-3 不同光照强度下光系统 II 能量分配比例随土壤含水量的变化

Figure 4-3 Changes in the proportion of energy allocation in photosystem II under different light intensities as affected by soil moisture

随着光强的增加， Φ_F 随 Φ_P 降低整体上呈现先增加后降低的趋势（图 4-4）。相比于 Φ_P 的 0-0.8 的变化范围， Φ_F 变化幅度较小，范围为 0.009-0.019。当 $\Phi_P < 0.25$ ， Φ_F 变化范围为 0.011-0.014（图 4-4）；当 $\Phi_P > 0.45$ ， Φ_F 与 Φ_P 呈现负相关关系；而当 Φ_P 介于 0.25 和 0.45 之间时， Φ_F 与 Φ_P 存在正相关关系，然而随着干旱程度的增加正相关关系减弱，由此导致了荧光和光合线性关系的解耦（图 4-4）。在严重干旱胁迫条件下 Φ_F 并没有明显降低，仍然维持在 0.01 以上，尽管叶绿素含量在干旱胁迫条件下有所下降（体现在 $\text{ChlF}_{686}/\text{ChlF}_{740}$ 比例上升），但是 APAR 依然较高，而 Φ_F 没有明显降低，由此导致在严重干旱胁迫下 ChlF_{686} 或者 ChlF_{740} 依然较高，这说明胁迫条件下叶片水平的叶绿素荧光仍然受到 PAR 的影响，而不是 Φ_F 。

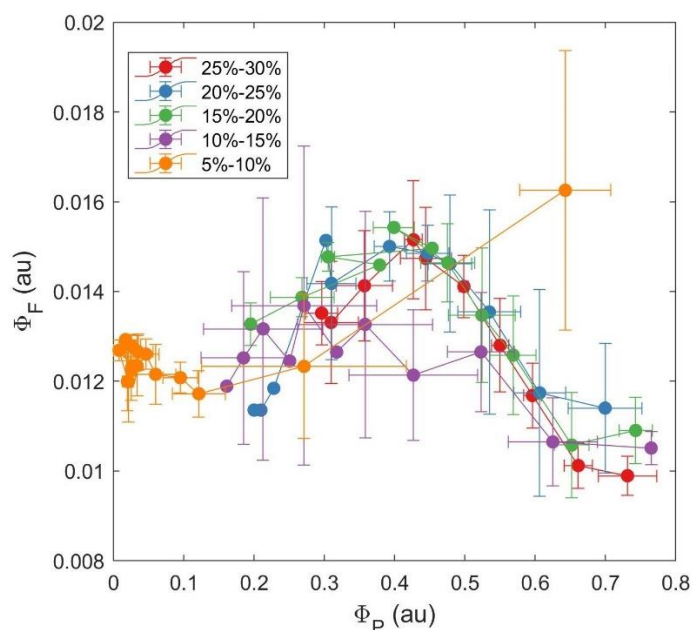


图 4-4 荧光量子产量 (Φ_F) 和光化学量子产量 (Φ_P) 随土壤含水量的变化

Figure 4-4 Changes in fluorescence quantum yield (Φ_F) and photochemical quantum yield (Φ_P) as affected by soil moisture

4.3 干旱胁迫下生理参数约束对荧光-光合关系的改进

实验结果显示在干旱胁迫下叶片叶绿素荧光(ChlF)与光合(A)的关系发生解耦, 为了提高 ChlF 对 A 的预测能力, 需要通过结合其他的生理变量进行 ChlF 约束, 通过将荧光、光合、PAM 的生理变量构建相关矩阵(图 4-5), 以获得与光合、荧光密切相关的生理变量。由相关矩阵可以得到存在极显著线性相关的变量组合, 即 $ETR \propto A$ ($r = 0.98$), $ChlF \propto PAR$ ($r = 0.99$), $PhiP \propto q_L$ ($r = 0.96$), $PhiP \propto NPQ$ ($r = -0.97$), ETR 表示光系统电子传递速率, 可由光化学量子产率 (PhiP) 与 PAR 计算得到:

$$ETR = PAR \times PhiP \times \alpha_{grn} \times \beta \quad (4-1)$$

式中, α_{grn} 表示绿色叶片对 PAR 的吸收效率, 值通常较为固定为 0.84, β 是分配给 PSII 的吸收 PAR 的分数(即 PSII 光学吸收截面), 通常按照 0.5 比例进行 PSI 和 PSII 吸收能量划分。根据相关矩阵中极显著线性相关变量, 可以将公式 (4-1) 中的 ETR 用 A 代替、PAR 用 ChlF 代替、PhiP 可以用 NPQ 或者 q_L 代替, 因此可以得到下面两个公式:

$$A \propto ChlF / NPQ \quad (4-2)$$

$$A \propto \text{ChlF} \times q_L \quad (4-3)$$

公式(4-2)表明叶片的光合速率与荧光的关系受到 NPQ 的约束,而公式(4-3)说明 PSII 光反应中心的开放程度(q_L)对光合速率和荧光的关系也有约束作用。

通过荧光-光合-热耗散同步测量的实验数据,本研究可以进行公式(4-2)和(4-3)验证(图 4-6)。结果显示,在干旱胁迫下 ChlF 与 A 的线性关系明显下降(图 4-6a 和 b),尤其是红光波段(近红外波段的 $R^2=0.16$,红光波段的 $R^2=0.08$),通过 ChlF/NPQ(图 4-6c 和 d)或者 ChlF $\times q_L$ (图 4-6e 和 f)均可以明显提高 A 的预测能力,近红外波段 R^2 分别提高 356%和 475%,而红光波段 R^2 提升更高,分别为 713%和 975%。相比于 ChlF/NPQ, ChlF $\times q_L$ 对 A 估算的能力更高,拥有更高的 R^2 和更低的 RMSE。当土壤含水量低于 10%时, ChlF/NPQ 对 A 估算能力明显下降(图 4-6c 和 d),这主要是由于在严重干旱胁迫下 NPQ 达到饱和失去了调节能力,而 ChlF $\times q_L$ 在严重干旱胁迫下依然能够有效估算光合速率(图 4-6e 和 f),这说明 q_L 相比于 NPQ 对光合的生理胁迫响应更为敏感,因此与 ChlF 结合能够更好的进行光合的估算。此外,研究结果还显示在干旱胁迫下近红外荧光(ChlF₇₄₀)相比于红光波段荧光(ChlF₆₈₆)对 A 的估算能力更高,这主要是由于在干旱胁迫下,植物的叶片会出现黄化、脱水等症状,这些症状会导致叶绿素含量降低,使得对 ChlF₆₈₆ 的重吸收减少,引起叶片表面 ChlF₆₈₆ 的增强。相比之下, ChlF₇₄₀ 主要来自于叶绿素的反射和散射,受到叶片色素重吸收的影响较小,同时, ChlF₇₄₀ 产率在干旱胁迫下降低更为明显。因此干旱胁迫下 ChlF₇₄₀ 相比于 ChlF₆₈₆ 对光合的估算能力更高。

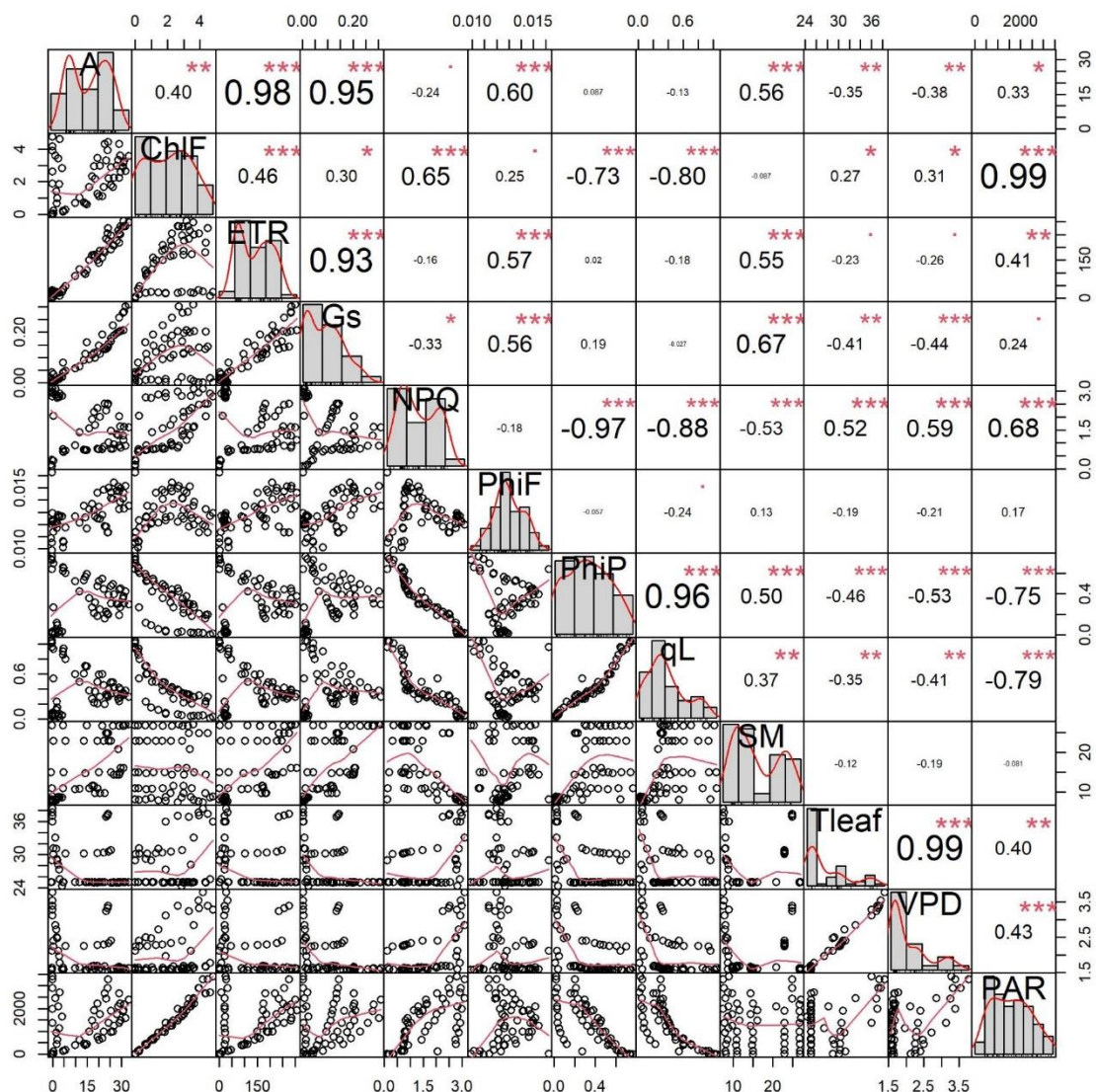


图 4-5 光合、荧光、环境相关变量相关关系矩阵。其中 A 表示净光合速率 ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), ChlF 表示 740 波段叶片叶绿素荧光 ($\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$), ETR 表示电子传递速率, Gs 表示气孔导度 ($\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), NPQ 表示非光化学淬灭系数, PhiF 表示荧光量子产量, PhiP 表示光化学量子产量, qL 表示 PSII 光反应中心开放程度, SM 表示土壤湿度 ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), Tleaf 表示叶片温度 ($^{\circ}\text{C}$), VPD 表示饱和水汽压差 (kPa), PAR 表示光合有效辐射 ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$)。

Figure 4-5 Correlation matrix of photosynthetic, fluorescence, and environmental variables. A represents the net photosynthetic rate ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), ChlF represents the leaf chlorophyll fluorescence (740 nm) ($\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$), ETR represents the electron transport rate, Gs indicates the stomatal conductance ($\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), NPQ represents the non-photochemical quenching coefficient, PhiF represents the fluorescence quantum yield, PhiP represents the photochemical quantum yield, qL indicates the openness of the PSII reaction centers, SM represents the soil moisture ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), Tleaf represents the leaf temperature ($^{\circ}\text{C}$), VPD indicates the vapour-pressure deficit (kPa), PAR indicates photosynthetically active radiation ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$).

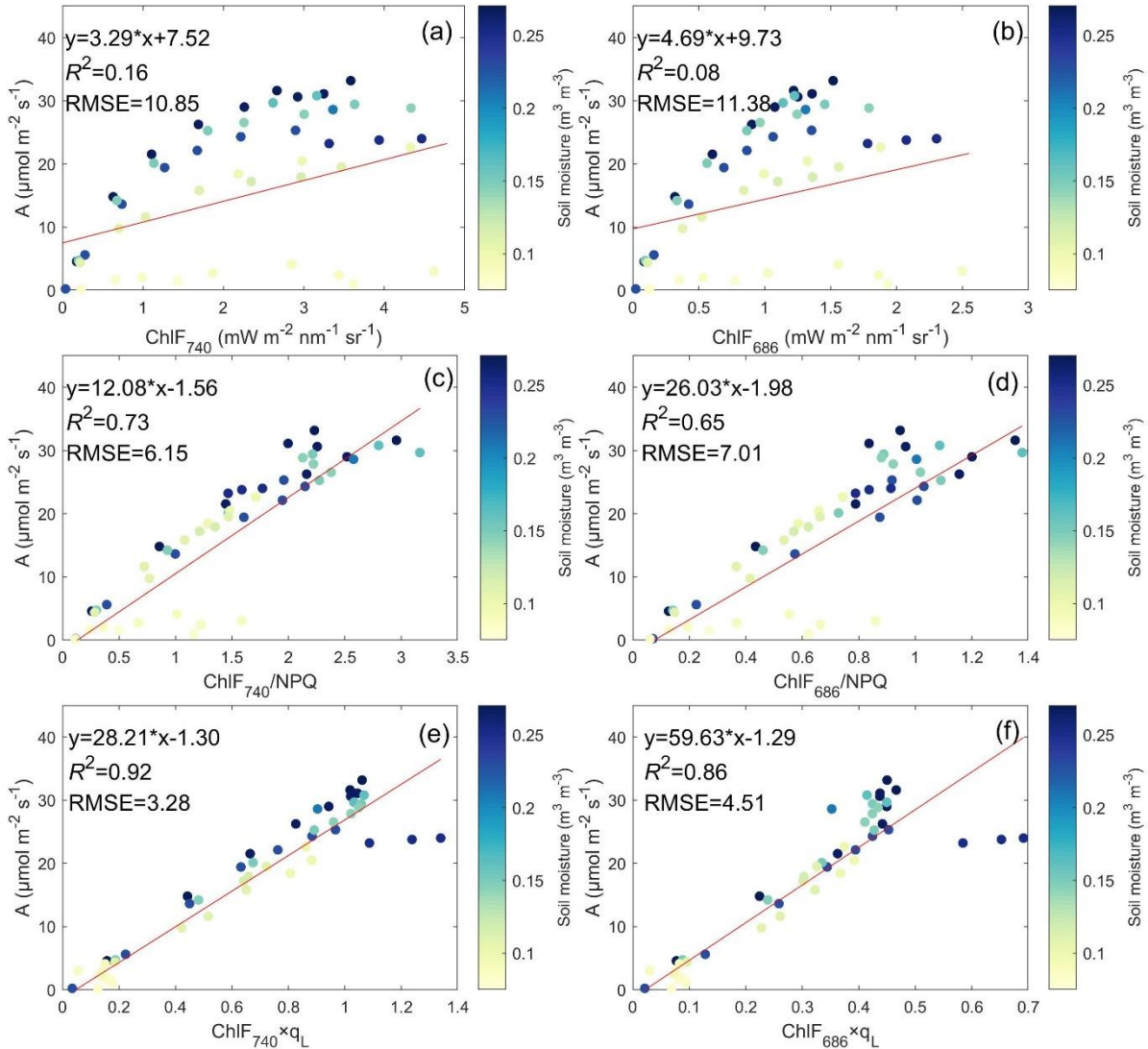


图 4-6 水分胁迫下无约束 (a, b) 和有 NPQ (c, d) 及 q_L (e, f) 约束下的叶绿素荧光 (ChIF) 与光合速率 (A) 的关系比较, a, c, e 为远红光波段 ChIF (ChIF₇₄₀); b, d, f 为红光波段 ChIF (ChIF₆₈₆)。

Figure 4-6 Comparison of the relationship between photosynthetic rate (A) and chlorophyll fluorescence (ChIF) under water stress without constraints (a, b) and with constraints of NPQ(c, d) and q_L (e, f). Panels a, c, e show the relationship between far-red ChIF (ChIF₇₄₀) and A, while panels b, d, f show the relationship between red ChIF (ChIF₆₈₆) and A.

4.4 讨论

干旱胁迫下叶绿素荧光光谱波段偏移的原因与叶绿素含量、光照强度等相关。Zhao 等(2020)通过对多个物种叶片上行荧光释放光谱进行分析,发现叶绿素荧光光谱的红峰

和远红外峰的位置受到不同物种、叶绿素含量、PAR 及灌溉条件的影响,如叶绿素含量降低时,远红外峰的位置会向蓝光位置偏移,而红峰位置却没有发生明显变化,这与本研究的玉米实验结果相符合。同时,Zhao 等人(2020)发现随着光强的增加,玉米叶片的红峰位置会向远红光位置偏移,而远红外峰位置则向相反方向移动,而本研究的结果显示在高叶绿素浓度情况下,随着光强的增加,玉米叶片的红峰和远红峰都会向远红光位置偏移。最后 Zhao 等(2020)结果表明在干旱胁迫条件下远红外峰的位置变化范围较宽,与本研究观测结果相符。目前对胁迫环境下叶绿素荧光光谱波段位置偏移的研究相对较少,这会限制荧光光谱在叶绿素含量和叶片氮含量的反演以及光合能力预测等方面的应用。

干旱胁迫下荧光与光合解耦的原因主要与气孔响应行为以及能量之间的复杂调节机制有关。在中度干旱条件下,本研究结果显示气孔快速关闭导致胞间二氧化碳浓度(C_i)降低,叶片由于 CO_2 不足,暗反应的光合速率会明显下降,由此可能导致 CO_2/O_2 比率下降,从而增加光呼吸和/或梅勒反应的速率,此阶段光合作用消耗的 ATP 相对较少,当光照过强时,叶绿素捕获的光能已经使光合能力达到饱和,并形成了过量的激发态的叶绿素,其所捕获的能量可以传递给叶黄素类物质,导致 NPQ 增加,来保护叶片光合器官免受强光的破坏。在重度干旱条件下,实验结果显示 C_i 浓度上升,这说明气孔因素对光合的限制作用降低,而非气孔限制成为主要因素,这是因为严重的水分胁迫会使得 Rubisco 酶活状态降低,从而限制固碳速率。此时,光化学量子产量达到最低, NPQ 达到饱和失去调节功能,导致荧光量子产量上升,因此光合与荧光关系解耦。Helm 等(2020)研究 SIF 和短期光合作用响应干旱的结果也表明,在干旱下气孔关闭限制了进入叶片的 CO_2 量(气孔限制)或导致叶片酶活状态变化从而抑制光合作用(非气孔限制),而荧光的减少量明显弱于 CO_2 同化量的减少量; Marrs 等(2020)在多个物种中也发现气孔关闭下叶片或冠层的叶绿素荧光并没有显著降低,因此气孔关闭下荧光不再适合作为追踪光合的指标。众多荧光与光合的胁迫生理实验结果表明,胁迫条件下由于荧光和光合产率的不协同变化,导致叶绿素荧光和光合的线性关系会下降。因此,在干旱胁迫下进行荧光与光合关系建模时,应考虑气孔因素和非气孔因素对其的影响,从而减少基于荧光的线性模型估算光合的不确定性。

本研究结果显示通过结合 q_L 参数可以有效约束荧光从而提高胁迫环境下光合的估算能力。其机理原因与 q_L (PSII 反应中心开放程度)和 PSII 的实际电子传递速率相关,Gu 等(2019)基于光能利用率模型机理推导了 SIF-GPP 耦合的基本方程,用来描述 SIF 的动力学过程及其与 C3 和 C4 光合作用的关系,该方程称之为机理光响应模型(MLR)。MLR 模型认为实际电子传递速率(J)是光合作用光反应和暗反应达到平衡时的实际光合同化速率,而 J 又与 SIF 和 q_L 的乘积线性相关, q_L 导致了 SIF-GPP 关系的非线性,因为随着 PAR 的增加, q_L 降低了 J 对 SIF 的敏感性。Han 等(2022)通过 MLR 模型研究

SIF 与 GPP 的关系也表明 q_L 参数对光强响应敏感, 可以通过两个参数 (a_{q_L} 和 b_{q_L}) 的指数方程来表示 q_L 和 PAR 之间的关系。本研究结果显示 q_L 对土壤水分响应也比较敏感, 可以作为环境胁迫因子用于约束叶绿素荧光从而提高干旱胁迫下光合预测能力。 q_L 还可能受到环境温度以及胞间二氧化碳浓度的影响(Han et al., 2022)。鉴于 q_L 参数在 SIF 估算 GPP 模型中的重要程度, 亟需通过叶片生理实验明确 q_L 参数与环境变量 (如光强、温度、VPD、CO₂、土壤水分) 的复杂关系, 并进行 q_L 机理建模, 从而更充分的理解 q_L 介导的 SIF 与 GPP 的生理与环境胁迫的关系, 提高 SIF-GPP 估算模型在胁迫环境条件下的稳健性。

4.5 小结

本章研究主要是基于玉米作物干旱处理实验以获取全波段荧光光谱、气体交换参数和荧光动力学参数等叶片生理响应数据, 并分析干旱胁迫对叶片光合与荧光生理过程以及光系统能量分配等影响。研究表明: PAR 是驱动叶绿素荧光变化的主要因素, 而气孔导度是控制光合速率大小的主要因素, 在干旱胁迫下, 光合速率随着气孔的关闭而显著降低, 但是叶绿素荧光并没有显著变化, 因此干旱胁迫下叶绿素荧光和光合关系会发生解耦。从光系统能量分配来看, 随着土壤含水量的降低, NPQ 增加以耗散多余热量保护叶片光系统, 同时, Φ_P 明显下降, 而 Φ_F 在高光和低光下对干旱胁迫响应程度不同: 当土壤含水量最低时, 高光下 Φ_F 下降而弱光下 Φ_F 上升。基于光系统电子传递速率机理方程, 本研究证明 $\text{ChlF} \times q_L$ 与干旱胁迫下光合速率高度线性相关 ($R^2 > 0.9$), 可用于改进干旱胁迫下对荧光-光合建模过程。

第五章 农田冠层 SIF 逃逸概率模拟与影响因素分析

在冠层尺度，荧光逃逸概率 (f_{esc}) 是进行荧光尺度上升的关键参数。然而农田的不同“垄行”种植模式会使得农田局部异质性增加，并且不同观测方向也会导致 f_{esc} 大小不同。本章研究采用辐射传输模型模拟的 f_{esc} 评估策略，探究荧光观测方向、农田株行距以及土壤反射率对 f_{esc} 的影响。为了实现这一目标，本研究使用一维 SCOPE 模型进行作物生长季荧光逃逸概率的模拟，研究不同方向性荧光逃逸概率的冠层敏感参数，并进行 f_{esc} 的估算。由于 SCOPE 模型假设植被冠层水平方向各向均一，因此，本研究使用三维 DART 模型来模拟更为真实的农田场景，通过模拟不同作物种植模式下的冠层顶 SIF 和基于 3D 辐射预算计算的冠层总发射 SIF，进行农田株行距以及土壤反射率对 f_{esc} 影响分析。

5.1 基于 SCOPE 模型模拟荧光逃逸概率

5.1.1 方向性和半球性荧光逃逸概率比较

通过 SCOPE 对作物生长期进行模拟，本研究可以获得叶片水平总荧光以及冠层水平半球性荧光以及方向性荧光，因此可以计算得到半球性荧光逃逸概率 (f_{esc_Hemis}) 和方向性荧光逃逸概率 (f_{esc_Direc})。由于观测方向可以自由设置，本研究选取垂直向下的观测方向 (Nadir)，即 f_{esc_Nadir} ，进行初步分析，模拟结果如图 5-1 显示。由图可知 f_{esc_Hemis} 高于 f_{esc_Nadir} ，而近红外波段的荧光逃逸概率又高于红光波段 (图 5-1)。在作物整个生长期内， f_{esc_Hemis} 在作物生长前期和后期变化较大，红光波段 f_{esc_Hemis} 变化范围为 0.30-0.64、近红外波段 f_{esc_Hemis} 变化范围为 0.4-0.61，而 f_{esc_Nadir} 变化波动较小，尤其是在近红外波段 f_{esc_Nadir} 变化范围仅为 0.38-0.41，在红光波段 f_{esc_Nadir} 变化范围为 0.26-0.42 (图 5-1)。 f_{esc_Hemis} 高于 f_{esc_Nadir} 的主要原因是从半球方向观测包含阴叶和阳叶部分可见的叶绿素荧光，而 Nadir 方向进行观测，荧光主要来自于阳叶部分，因此 f_{esc_Hemis} 高于 f_{esc_Nadir} 。此外， f_{esc_Nadir} 和 f_{esc_Hemis} 在作物生长期的变化趋势与荧光波段相关，在近红外波段， f_{esc_Nadir} 与 f_{esc_Hemis} 呈现负相关关系，而在红光波段呈现正相关关系 (图 5-1)，这主要是由于在近红外波段，叶绿素吸收光的能力比较弱，导致荧光信号主要来自于叶片表面的反射和散射，在 LAI 较低的情况下，荧光信号容易向各个方向散射，从而导致 f_{esc_Hemis} 较高，而 f_{esc_Nadir} 在 LAI 较低的时候容易受到土壤背景的影响，LAI 越低，裸露的土壤对荧光的反射能力较强，因此 f_{esc_Nadir} 有所增加；在红光波段，荧光逃逸概率主要与叶绿素含量和 LAI 相关，在植物生长早期 LAI 比较低，荧光有较大的可能性逃逸到冠层顶，然而随着 LAI 的增加，

叶绿素对红光的荧光吸收能力增加，因此红光波段 f_{esc_Nadir} 和 f_{esc_Hemis} 都有所降低，在生长后期随着 LAI 的下降， f_{esc_Hemis} 有所增加。

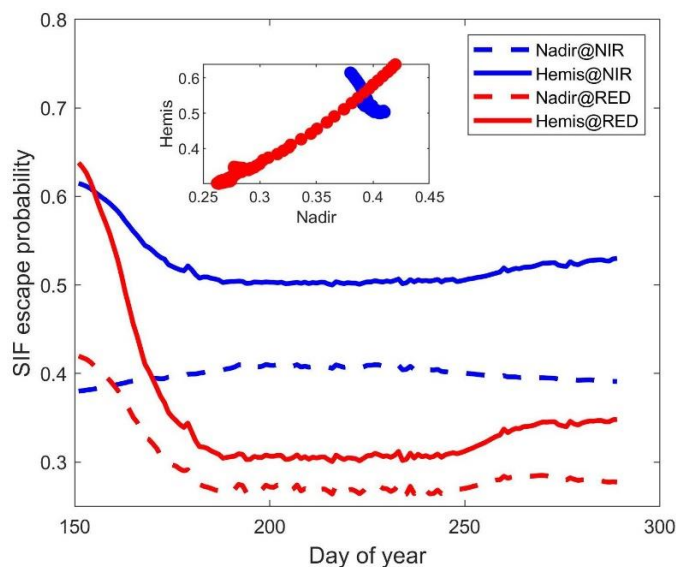


图 5-1 作物生长期不同观测方向（半球 Hemis.和近地面 Nadir）红光（红色）和近红外（蓝色）波段荧光逃逸概率变化

Figure 5-1 Changes in fluorescence escape probability in the red (red) and near-infrared (blue) bands for different observation directions (hemisphere and Nadir) during crop growth stages.

5.1.2 方向性和半球性荧光逃逸概率全局敏感性分析

Sobol 方法可以用于分析全局敏感性参数，以评估荧光逃逸概率的主导因素，包括冠层结构、叶片光学属性和观测角度等对方向性和半球性荧光逃逸概率的影响。本研究计算了六个参数：叶面积指数(LAI)、叶倾角分布函数(LIDF)、土壤亮度参数(BSMrightness)、叶绿素含量(Cab)、观测角度(tto)和太阳角度(tts)，对荧光全波段（650-850 nm）下 f_{esc_Hemis} 和 f_{esc_Direc} 的 Sobol 指数（见图 5-2）。结果表明，单独 LAI 一个参数对 f_{esc_Hemis} 影响就超过 50%，特别是在 750nm 之前，而在 750nm 波段之后 BSMrightness 和 LIDF 的影响增加（图 5-2a）。LAI 和 LIDF 是影响 f_{esc_Hemis} 的主要因素，Cab 和 tts 参数对 f_{esc_Hemis} 影响比较弱，tto 对 f_{esc_Hemis} 没有影响（图 5-2b）。在 f_{esc_Direc} 模拟方面，LIDF 和 tto 是主要的驱动因素（图 5-2d），而 LAI 仅在 750nm 波段之前有略微影响（图 5-2c）。Cab 和 tts 参数对 f_{esc_Direc} 影响较弱可以忽略（图 5-2d）。总的来说，叶面积指数和叶倾角分布函数是影响荧光逃逸概率的关键因素，这些结果为荧光逃逸概率的估算提供了重要的参考依据。

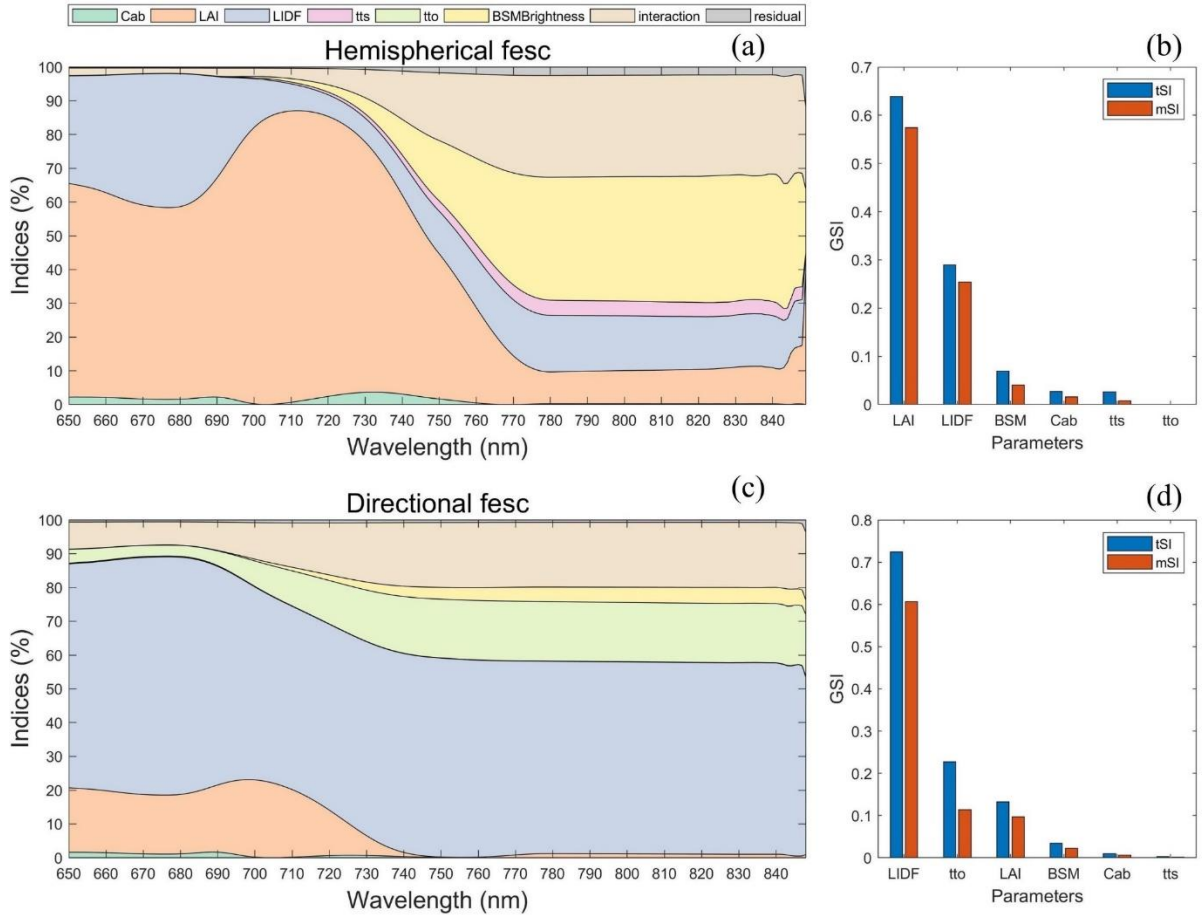


图 5-2 不同荧光波长下方向性和半球性荧光逃逸概率参数敏感性比较

Figure 5-2 Comparison of sensitivity of directional and hemispherical fluorescence escape probability parameters at different fluorescence wavelengths

图 5-3 结果显示 f_{esc_Hemis} 和 f_{esc_Direc} 由红光到近红外波段均呈现逐渐升高的趋势，然而其波动大小不同。 f_{esc_Hemis} 在红光波段波动较大，如 686nm 波段变化范围为 0.29-0.53（图 5-3a）；在近红外波段波动较小，如 760nm 波段变化范围为 0.49-0.57（图 5-3a）。 f_{esc_Direc} 在红光和近红外波段波动均较大，其偏差大小约为 ± 0.13 （图 5-3b）。这说明对 f_{esc_Hemis} 在近红外波段较为稳定，主要受到 LAI 的影响，因此可以通过 LAI 进行 f_{esc_Hemis} 的估算。而 f_{esc_Direc} 在荧光全波段受到冠层叶倾角影响较大，但是冠层叶倾角在实际应用中较难准确测量，因此利用叶倾角参数直接进行 f_{esc_Direc} 估算较为困难。

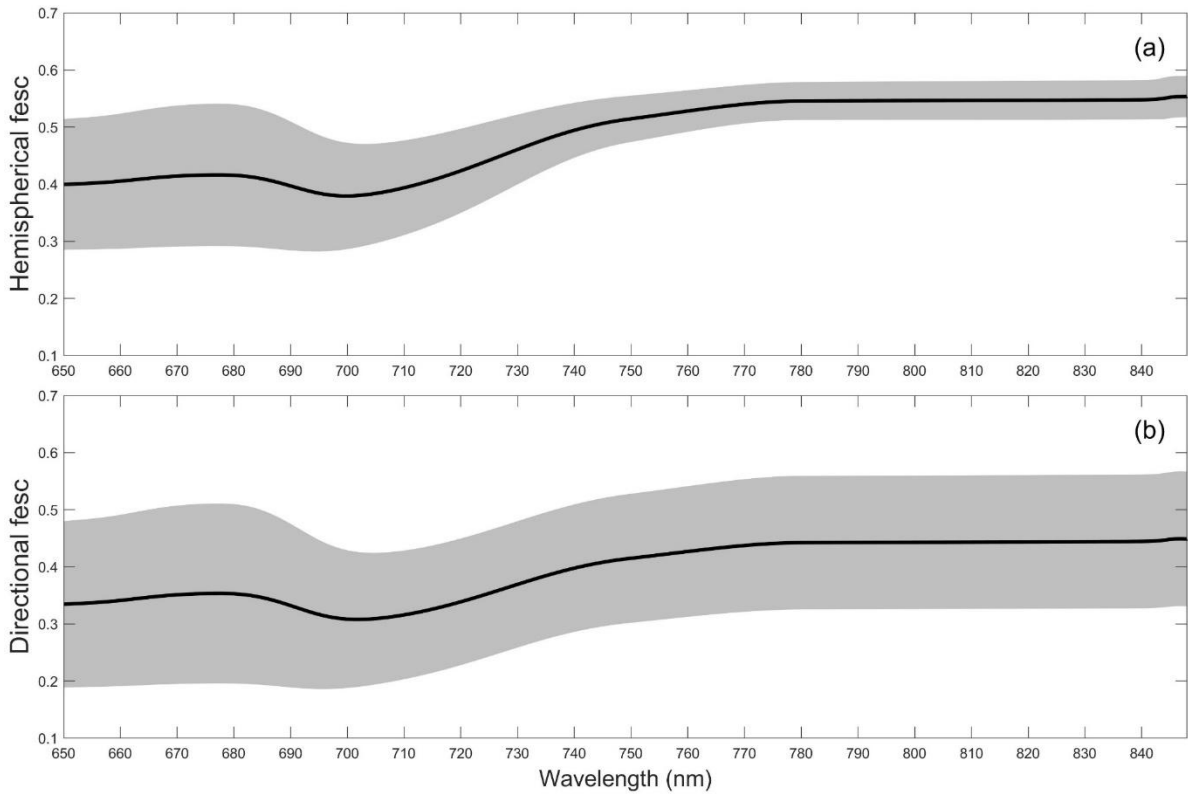


图 5-3 不同荧光波长下半球性和方向性荧光逃逸概率变化，黑线表示平均值，灰色阴影表示标准偏差。

Figure 5-3 Changes in hemispherical and directional fluorescence escape probabilities at different fluorescence wavelengths, where the black line represents the mean value and the gray shaded area represents the standard deviation.

5.1.3 方向性和半球性荧光逃逸概率估算

5.1.3.1 半球性逃逸概率模拟验证

本研究通过结合反射系数 (ρ) 和消化系数 (k)，即公式 (2-3) 进行了 f_{esc_Hemis} 的计算，基于 SCOPE 模型模拟的不同叶绿素浓度下作物生长期的 f_{esc_Hemis} ，通过优化算法拟合以获得不同叶绿素浓度及波长下的 ρ 和 k 。图 5-4 是在叶绿素浓度为 $80 \mu\text{g cm}^{-2}$ 时 SCOPE 模拟与估算结果的例子， f_{esc_Hemis} 估算方法与 SCOPE 模型模拟作物生长期红光和近红外 f_{esc_Hemis} 在生育期内变化趋势和大小一致， $R^2 > 0.96$ 并且 $\text{RMSE} < 0.0085$ 。这说明 f_{esc_Hemis} 估算方法的有效性。

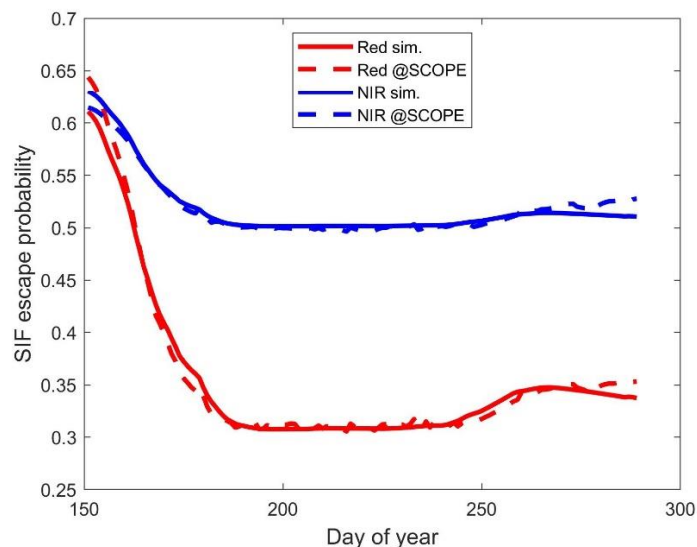


图 5-4 比较荧光逃逸概率估算方法与 SCOPE 模型模拟作物生长期红光和近红外半球性荧光逃逸概率 ($C_{ab} = 80 \mu\text{g cm}^{-2}$)

Figure 5-4 Comparison of fluorescence escape probability estimation methods and SCOPE model simulation of hemispherical fluorescent escape probability of red and near-infrared during crop growth period ($C_{ab} = 80 \mu\text{g cm}^{-2}$)

进一步在不同叶绿素浓度下，模型验证结果如图 5-5 所示：基于 ρ 和 k 可以很好的模拟近红外和红光波段的 f_{esc_Hemis} ， R^2 均高于 0.9（图 5-5c），RMSE 低于 0.009（图 5-5d）。不同叶绿素浓度下的 ρ 和 k 随着波长变化较为明显， ρ 在红光波段较低，值约为 0.28，而在近红外波段较高，值约为 0.53（图 5-5a）；而 k 与波段呈现双峰的结构，即在 700nm 和 780nm 左右突然上升（图 5-5b）。相比于 ρ ， k 对叶绿素浓度变化响应更为敏感，在近红外波段消化系数范围为 0.65-0.9，在红光波段范围为 0.5-0.7（图 5-5b）。验证结果表明基于 ρ 和 k 可以有效估算作物冠层不同荧光波段的 f_{esc_Hemis} 。

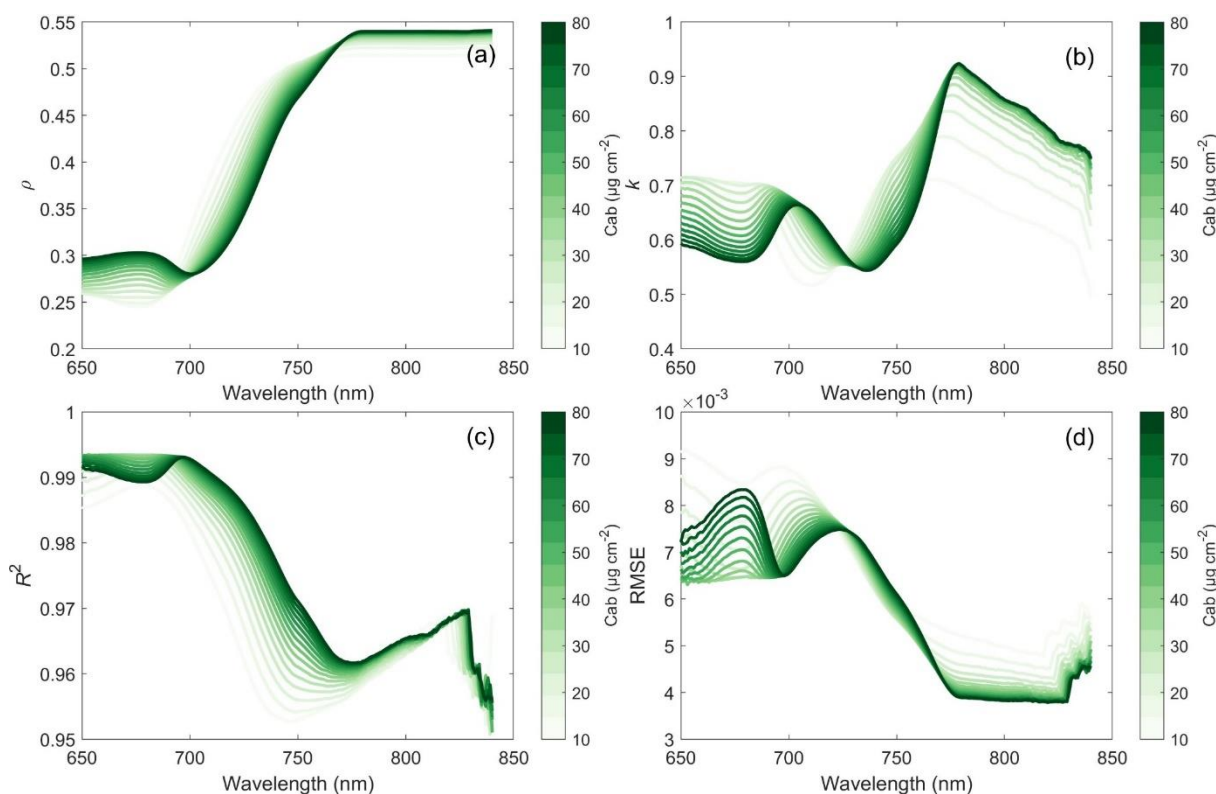


图 5-5 不同叶绿素浓度下半球型荧光逃逸概率估算反射系数 (ρ , a) 和消化系数 (k , b) 随荧光波段的变化以及验证效果 R^2 (c) 和 RMSE (d)

Figure 5-5 Changes in the estimated scattering coefficient (ρ , a) and absorption coefficient (k , b) of the hemispherical fluorescence escape probability under different chlorophyll concentrations as a function of fluorescence band, as well as validation results of R^2 (c) and RMSE (d)

5.1.3.2 方向性荧光逃逸概率估算

f_{esc_Direc} 可以通过结合植被近红外反射率与 NDVI 的乘积 (NIR_V) 和光合有效辐射的吸收比例 (f_{APAR}) 进行近似估算。本研究将 SCOPE 模拟的方向性荧光逃逸概率认为是“真实值”，验证结果显示：在广泛的模拟环境条件下，包括 Cab、LIDF、LAI、土壤亮度以及太阳和视角几何变化等情况，基于 NIR_V/f_{APAR} 的方法与近红外方向性逃逸概率非常一致，具有较高的 R^2 (0.89) 以及较低的 RMSE (0.04) (图 5-6a)。此外，模拟值与真实值之间的斜率接近 1，整体上模拟值略微低于真实值 (图 5-6a)。与之相比，基于 NIR/f_{APAR} 的方法估计的 f_{esc_Direc} 非常不确定， R^2 为 0.41，RMSE 为 0.09 (图 5-6b)，效果显然弱于 NIR_V/f_{APAR} 的方法，这主要是由于 NIR/f_{APAR} 方法没有考虑到土壤背景的变化，由此可能导致模拟的 f_{esc_Direc} 偏高。因此，通过考虑土壤背景的影响， NIR_V/f_{APAR} 可以在广泛的观测条件下进行的 f_{esc_Direc} 可靠估计，而无需获得关于冠层叶倾角和观测角度的额外信息。

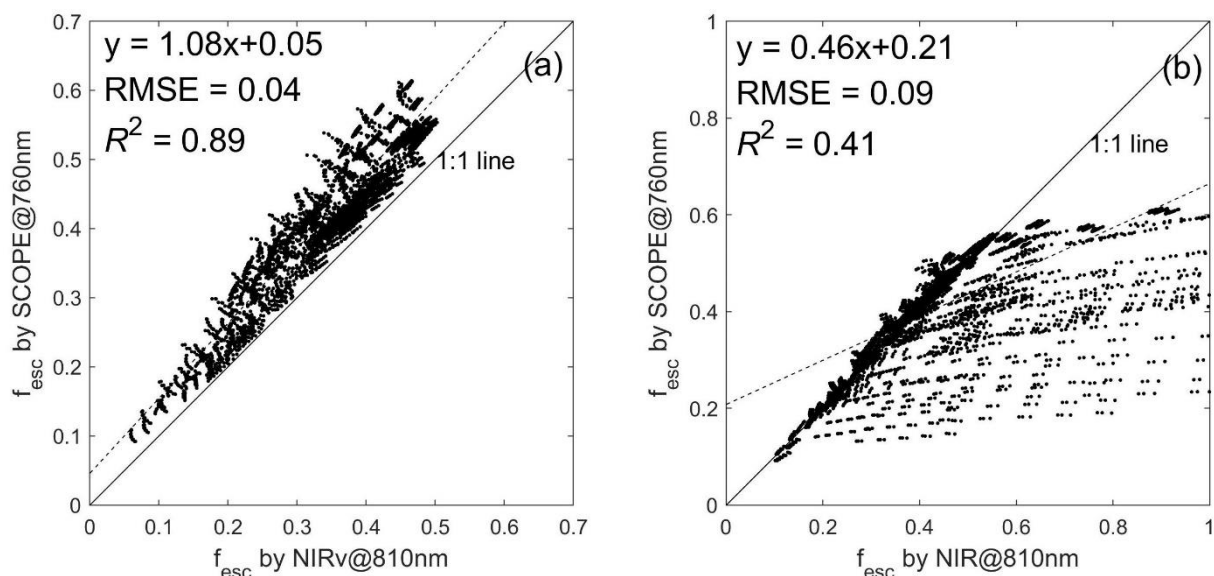


图 5-6 比较 NIRv 方法 (a) 和 NIR 方法 (b) 对基于 SCOPE 模拟的方向性荧光逃逸概率估算效果

Figure 5-6 Comparison of the performance of the NIRv method (a) and NIR method (b) in estimating directional fluorescence escape probability based on SCOPE simulation

5.2 基于三维 DART 模型模拟农田冠层荧光逃逸概率

本研究通过三维荧光模型 DART 进行了不同农田场景的模拟，并考虑了土壤反射率的影响，结果如图 5-7 所示：株距和土壤反射率交互作用对荧光逃逸概率影响较大，当株距为 0.5 m（植株密度最低）时，土壤反射率对荧光逃逸概率具有显著的影响（图 5-7）。随着株距的降低（植株密度的增加），土壤反射率对荧光逃逸概率影响的效应降低（图 5-7a），这说明植株密度对荧光逃逸概率和土壤反射率之间的关系起到了调节作用。当株距为 0.15 时，不同反射率下的荧光逃逸概率值均为 0.36，没有显著性差异，这说明在高植株密度情况下，土壤反射率对荧光逃逸概率影响最低（图 5-7a）。行距对荧光逃逸概率的影响如图 5-7b 显示，在行距为 1 m 和 0.5 m 情况下荧光逃逸概率分别为 0.38 和 0.46，有显著差异，行距的变化会导致荧光逃逸概率的显著变化，这说明行距对荧光逃逸概率的影响最大。在高植株密度相同行距中，土壤反射率对荧光逃逸概率无显著影响（图 5-7b），这表明在 LAI 较高时，土壤反射率不是影响荧光逃逸概率的主要因素。综上所述，农田场景模拟研究结果表明行距是影响荧光逃逸概率的主要因素。同时，土壤反射率在低植株密度下对荧光逃逸概率起到了显著作用。

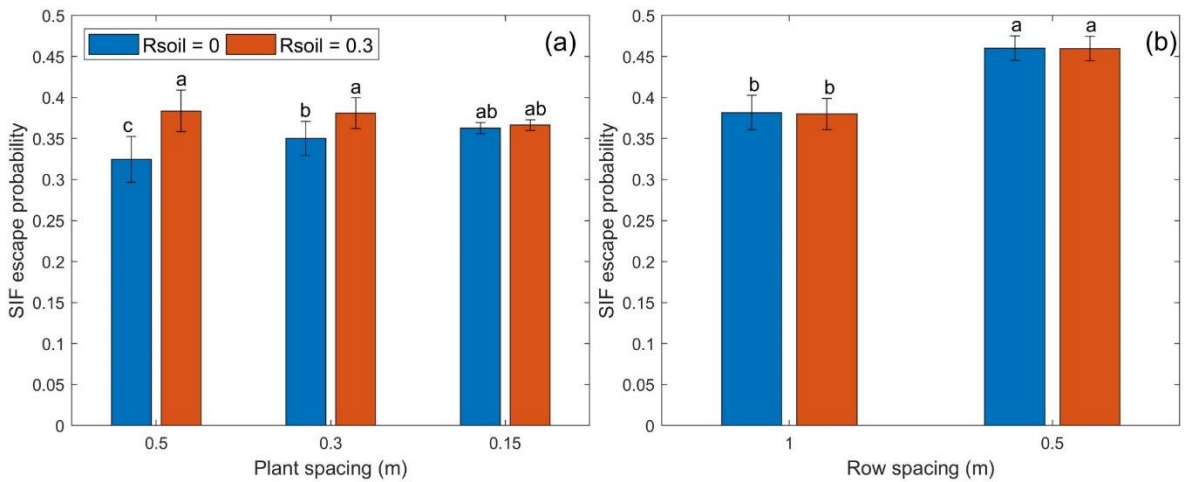


图 5-7 不同土壤反射率下株距 (a) 和行距 (b) 对荧光逃逸概率的影响

Figure 5-7 The effect of plant spacing (a) and row spacing (b) on fluorescence escape probability under different soil reflectance

5.3 讨论

农田冠层荧光逃逸概率会受到观测方向、农田株行距以及土壤反射率的影响。研究结果显示半球性荧光逃逸概率高于方向性荧光逃逸概率，两者都易受到冠层叶倾角的影响，不同的是方向性荧光逃逸概率容易受观测角度的影响，而半球性荧光逃逸概率更易受到 LAI 的影响。由于不同方向荧光逃逸概率对参数响应的敏感程度不同，使得其估算难度不同。因此，从建模角度来说，半球性荧光逃逸概率更容易计算，如本研究提出的基于 ρ 和 k 方法可以准确模拟作物生长季半球性荧光逃逸概率 ($R^2 > 0.9$)，而从观测角度来说，方向性荧光逃逸概率更易通过基于近红外的反射率方法获得，如 $NIRv/f_{APAR}$ ($R^2 = 0.89$)。有研究表明观测方向的荧光可以转换为任意方向的荧光。如 Hao 等(2021b)提出的两种实用的、物理上可靠的方法来消除各向异性 SIF 观测的方向性效应：一种是基于植被的近红外或红色反射率，另一种是基于核驱动模型的多角度 SIF 测量。通过消除 SIF 观测的方向性效应从而获得 Nadir、热点方向或者半球方向的 SIF，可用于更准确的估算冠层 GPP。

减少农田作物种植行距会显著增加荧光逃逸概率说明农田行距对其影响较大。尽管农田冠层整体上较为均一，但是不同行播种植方式也会使得冠层局部异质性增加，这是农田相比森林或者草地植被类型最大的不同。一维辐射传输模型假设冠层是均匀分布的，因此是否适用于这种“垄行”结构明显的农田场景存疑。Zhao 等(2010)通过分离入射直接辐射和漫射辐射的贡献，建立了行播种植冠层反射率模型，模拟结果表明行播冠层的反射率分布特征与均质冠层明显不同，这意味着用一维辐射传输模型来估计“垄行”类型冠层结构参数是有问题的。因此在进行“垄行”种植结构的农田冠层逃

逸系数估算时需要进一步考虑作物种植行距对其影响。

土壤背景对基于反射率方法进行荧光逃逸概率估算有着重要影响。Liu 等(2020)用 DART 模型进行了 SIF 逃逸概率数值模拟实验,用它来评估 $NIRv/f_{APAR}$ 估计方法的有效性,结果显示在大多数情况下,归一化差异植被指数(NDVI)可以部分消除背景反射率对 SIF 逃逸概率估计的影响,但如果背景部分或全部被覆盖,则无法准确的估计。由于可见近红外反射率包括植被和土壤两者的贡献,Zhang 等(2019)通过计算观测反射率与可见土壤近红外反射率相减,从而获得纯植被的近红外反射率,以此估算的冠层总荧光相比未经过土壤反射率校准的冠层总荧光与 GPP 的线性关系更强。Yang 等(2020)基于光谱不变量理论进一步推导发现近红外和可见光波段(400-700nm)反射率之差(FCVI),可用于修正远红外 SIF 的 PAR 吸收和散射效应,但同样会受到土壤背景的影响在低植被覆盖度下估计估计不准确。本研究结果显示,在低植株密度下,高亮度的土壤反射率会显著增加荧光逃逸概率。因此在基于观测的近红外反射率进行荧光逃逸概率建模过程中必须考虑到土壤反射率对其影响。

5.4 小结

本章研究主要通过 SCOPE 模型和 DART 模型进行农田冠层荧光逃逸概率模拟,分析不同波段、观测方向、农田场景以及土壤反射率对荧光逃逸概率的影响,并进行了荧光逃逸概率的估算。研究表明:在作物生长高峰期,无论是荧光波段还是观测方向,荧光逃逸概率基本上不发生变化,而在作物生长前期和后期,荧光逃逸概率变化幅度比较大, f_{esc_Hemis} 变化幅度高于 f_{esc_Nadir} ; 红光波段的 f_{esc} 弱于近红外波段,尤其是 f_{esc_Hemis} ; 敏感性分析结果表明 f_{esc_Hemis} 主要受到 LAI 和 LIDF 参数的影响,在不同荧光波段参数的敏感程度不同,而 f_{esc_Direc} 主要受到 LIDF、tto 以及 LAI 参数的影响; f_{esc_Hemis} 可以通过结合 LAI 以及不同波段的 ρ 和 k 准确模拟 ($R^2 > 0.95$), 而 f_{esc_Direc} 可以通过 $NIRv/f_{APAR}$ 方法进行估算 ($R^2 = 0.89$); 在种植密度比较低时,土壤反射率对荧光逃逸概率影响比较大,而在高种植密度下,土壤反射率对荧光逃逸概率无显著影响;种植行距相比种植株距对荧光逃逸概率影响更大。本研究可为农田冠层逃逸概率模拟与估算提供借鉴依据。

第六章 利用集成 APSIM 模型模拟作物冠层顶日光诱导叶绿素荧光

作物模型可用于预测作物产量、制定不同的农田管理策略以及评估气候变化对作物的影响。其中应用最为广泛的 APSIM（农业生产系统模拟器）作物模型，已发展成为一个包含多个过程模块的平台，可以模拟农业生产系统的各个方面，并允许对管理情景进行灵活的设置(Holzworth et al., 2014)。作物生长过程和产量模拟的一个关键驱动因素是冠层光合作用。在经典版本的 APSIM 作物模型中，每日的潜在光合速率（生物量积累）是基于辐射拦截和辐射利用效率（RUE）(Sinclair and Muchow, 1999)方案进行估算的。RUE 是物种特定的，不同的物候阶段之间存在差异。空气温度、土壤水供应、CO₂ 浓度和植物营养的影响是通过使用一系列胁迫因子函数来确定的，这些胁迫因子函数会降低潜在的光合速率。虽然基于 RUE 方式进行冠层光合作用建模简单明了，但并不能明确量化这些限制因素在光合作用中的具体贡献。最近，Wu 等(2019)在 APSIM（APSIM v. 7.8）中添加了一个跨尺度的光合作用模型，即昼夜冠层光合作用-气孔导度模块。与经验性的 RUE 方法相比，DCaPST 模块在叶片和冠层尺度上更加机理地模拟作物冠层的光合作用，可用于评估叶片级别光合生理参数变化对冠层碳同化以及作物产量的影响。通过叶级光合作用模拟，为耦合作物模型与叶绿素荧光提供了接口。在本章研究中详细描述了 SIF 模块的开发及其集成到 APSIM-DCaPST 框架中的物理过程，并明确说明了冠层总荧光转换为冠层顶荧光的所有步骤。在此之后，本研究将耦合 SIF 模块的 APSIM-DCaPST 模型简称为 APSIM-SIF 模型。

6.1 SIF 与作物模型耦合方法

6.1.1 DCaPST 模块

Wu 等(2019)在 APSIM 作物模型框架(v. 7.8)下开发了一个新的光合作用模块(DCaPST)。DCaPST 由冠层叶面积指数、比叶氮含量和作物供水以及日降水量、太阳辐射、最高和最低气温等日常气象数据驱动，并模拟每日生长的生物量(BIO_{shoot_day} , g 生物量 $m^{-2} day^{-1}$)，模拟的生物量反馈到 APSIM 作物模型中，从而进行作物生长发育模拟。DCaPST 采用阴阳叶冠层模型进行光合模拟，采用的 Farquhar、von Caemmerer 和 Berry(Farquhar et al., 1980)提出的生物化学光合模型（FvCB）进行作物冠层中阳光照射部分和阴影部分的光合计算，然后加和得到每日光合 CO₂ 同化速率(A , $\mu mol CO_2 m^{-2} day^{-1}$)。 A 可用于计算 BIO_{shoot_day} :

$$BIO_{shoot_day} = A \times \frac{44g/mol}{1,000,000} \times \frac{B}{1 + root : shoot} \quad (6-1)$$

式中, B 是 CO_2 转化为生物质和维持呼吸的生化转化系数, 对于玉米和大豆分别设置为 0.41 和 0.34 ($\text{g 生物量} (\text{g CO}_2)^{-1}$) (Sinclair and Horie, 1989); root:shoot 是根部和地上部生物量的比值, 在作物生长早期阶段, 这个比值会增加, 并在开花后逐渐减少(Wu et al., 2019)。DCaPST 模块还使用特定叶片氮含量 (SLN, g N m^{-2}) 来表示作物叶片氮状态, 它限制了与光合作用相关的关键生理参数, 如 Rubisco 最大羧化速率和最大电子传递速率。APSIM-DCaPST 模型已经通过观测数据进行了验证, 并能够解释 C3 小麦和 C4 高粱作物产量近 90% 的变化(Wu et al., 2019)。

6.1.2 SIF 耦合 APSIM 作物模型过程 (APSIM-SIF)

从叶片发射出的总 SIF 可以看作是冠层吸收的光合有效辐射 (APAR, mW m^{-2}) 与冠层荧光量子产率的乘积(Guanter et al., 2014):

$$\text{SIF}_{tot_full} = \text{PAR} \times f_{\text{APAR}} \times \Phi_{\text{F}} = \text{APAR} \times \Phi_{\text{F}} \quad (6-2)$$

式中, SIF_{tot_full} 是叶片释放的全波段叶绿素荧光 (640-850 nm); PAR 是冠层顶部光合有效辐射, 通常认为 PAR 占太阳辐射总能量的 50%; f_{APAR} 是植被光合有效辐射吸收系数, Φ_{F} 是荧光量子产量 (每吸收一个光子产生的光子数)。在 DCaPST 模块中, 使用 De Pury and Farquhar (1997) 所用的方法计算 APAR (因此也可计算 f_{APAR})。

除了 SIF 的发射之外, APAR 还有其他两条能量利用途径: 光合作用 (能量来自光化学淬灭) 和非光化学淬灭 (NPQ) 或热耗散。类比于 Φ_{F} , 它们的量子产量可以表示为 Φ_{P} 和 Φ_{NPQ} 。此外, Φ_{NPQ} 是光适应条件下 (Φ_{N}) 和暗适应条件下 (Φ_{D}) 的热耗散之和。因此, 根据能量守恒有:

$$\Phi_{\text{F}} + \Phi_{\text{P}} + \Phi_{\text{N}} + \Phi_{\text{D}} = 1 \quad (6-3)$$

每个量子产量可以通过它们的速率常数 (k) 进行表示:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_F = \frac{k_F}{\Sigma K} \\ \Phi_P = \frac{k_P}{\Sigma K} \\ \Phi_N = \frac{k_N}{\Sigma K} \\ \Phi_D = \frac{k_D}{\Sigma K} \\ \Sigma K = k_F + k_P + k_N + k_D \end{array} \right. \quad (6-4)$$

Φ_F 可以写成(Lee et al., 2015):

$$\Phi_F = \frac{k_F}{k_F + k_N + k_D} (1 - \Phi_P) \quad (6-5)$$

式中, Van der Tol 等(2014)建议 $k_F = 0.05$, $k_D = \max(0.03T_{air} + 0.0773, 0.87)$, T_{air} 为空气温度 ($^{\circ}\text{C}$); k_N 可以表示为光反应中心开放程度的函数(Van der Tol et al., 2014):

$$k_N = \frac{(1 + \beta)x^\alpha}{\beta + x^\alpha} \times k_N^o \quad (6-6)$$

式中, k_N^o 、 α 和 β 是拟合参数。基于在无胁迫条件下生长的棉花的 PAM 测量, 这些参数分别为 2.58、2.83 和 0.114(Van der Tol et al., 2014)。 x 的范围从 0 (光反应中心完全开放) 到 1 (光反应中心完全关闭), x 可以定义为(Van der Tol et al., 2014):

$$x = 1 - \frac{\Phi_P}{\Phi_{P0}} = 1 - \frac{J_e}{J_0} \rightarrow \Phi_P = \frac{J_e}{J_0} \Phi_{P0} \quad (6-7)$$

式中, Φ_{P0} 是在暗适应条件下观察到的最大光化学量子产量; J_e 是实际电子传输速率 ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$); J_0 是在 25°C 时由 APAR 和暗适应速率常数计算的最大电子传输速率 ($\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$)。 J_e 可以通过以下公式估计(Lee et al., 2015):

$$J_e = \begin{cases} A \frac{C_i + 2\Gamma^*}{C_i - \Gamma^*} & \text{C3} \\ A & \text{C4} \end{cases} \quad (6-8)$$

式中, C_i ($\mu\text{mol mol}^{-1}$) 是胞间 CO_2 浓度; Γ^* ($\mu\text{mol mol}^{-1}$) 是 CO_2 补偿点。通过结合公式 6-2、6-5、6-6、6-7 和 6-8, 可以得到 C3 和 C4 作物的 SIF_{tot_full} , 如下所示:

$$\text{SIF}_{tot_full} = \frac{k_F}{k_F + \frac{(1+\beta)x^\alpha}{\beta+x^\alpha} \times k_N^0 + k_D} \left(1 - \Phi_{P0} \times \frac{A \frac{C_i + 2\Gamma^*}{C_i - \Gamma^*}}{J_0} \right) \times \text{APAR} \quad \text{C3} \quad (6-9)$$

$$\text{SIF}_{tot_full} = \frac{k_F}{k_F + \frac{(1+\beta)x^\alpha}{\beta+x^\alpha} \times k_N^0 + k_D} \left(1 - \Phi_{P0} \times \frac{A}{J_0} \right) \times \text{APAR} \quad \text{C4} \quad (6-10)$$

式中, Γ^* 可以使用叶片光合作用的 CO_2 响应曲线的 FvCB 模型(Farquhar et al., 1980)进行估计; C_i 、 J_0 、 A 和 APAR 可以从 APSIM-DCaPST 模型中模拟得到。

6.1.3 将 SIF_{tot_full} 转换为 $\text{SIF}_{toc}(\lambda)$

在第 6.1.2 节中计算得到的 SIF_{tot_full} 是叶片尺度上的全波段 SIF。而遥感或近地表光谱传感器测量到的 SIF 信号是波长为 λ nm 的冠层顶 SIF ($\text{SIF}_{toc}(\lambda)$, $\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$)。由于叶片内部以及冠层内的散射/(再)吸收过程, 冠层顶测量到的 $\text{SIF}_{toc}(\lambda)$ 仅占 SIF_{tot_full} 的一小部分。本研究通过两个步骤来进行 SIF_{tot_full} 到 $\text{SIF}_{toc}(\lambda)$ 的转换: (1) 将 SIF_{tot_full} 转换为 $\text{SIF}_{toi}(\lambda)$ ($\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1}$), 即波长为 λ nm 时所有叶片发出的总荧光, 和 (2) 将 $\text{SIF}_{toi}(\lambda)$ 转换为 $\text{SIF}_{toc}(\lambda)$, 即波长为 λ nm 时冠层顶观测方向的荧光。转换过程需要考虑 SIF 的波段性以及叶片和冠层中的散射/(再)吸收过程的影响。

6.1.3.1 将 SIF_{tot_full} 转换为 $\text{SIF}_{toi}(\lambda)$

首先, 本研究使用 FLUSPECT 模型(Vilfan et al., 2016)模拟的叶片激发-荧光矩阵 (EF-矩阵) 将 SIF_{tot_full} 转换为 $\text{SIF}_{toi}(\lambda)$ 。EF-矩阵 (351×211) 可以将激发光谱 (400-750 nm) 转换为具有 1 nm 分辨率的荧光发射光谱 (640-850 nm)。FLUSPECT 是 PROSPECT(Jacquemoud and Baret, 1990)叶片光学模型的扩展, 它包括叶片内叶绿素荧光的散射和吸收模拟。FLUSPECT 根据 PSI (Fqe1) 和 PSII (Fqe2) 的荧光量子产量、叶片结构和生化参数生成四个 EF-矩阵, 包含 PSI 和 PSII 的叶片上行荧光激发矩阵和叶片下行荧光激发矩阵。

在 FLUSPECT 中, $SIF_{tot}(\lambda)$ 是这四个 EF 矩阵的总和(EF_{sum})和辐照度(400-750 nm)的乘积。由于 APSIM 模型没有模拟太阳辐射光谱, 因此无法直接从 EF 矩阵和太阳辐射光谱的乘积中获得 $SIF_{tot}(\lambda)$ 。因此, 本研究定义一个 SIF 波段转换因子(ε, nm^{-1})将 SIF_{tot_full} 转换为 $SIF_{tot}(\lambda)$:

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{\sum_{i=400}^{750} EF_{sum}(i, \lambda)}{\sum_{\lambda=640}^{850} \sum_{i=400}^{750} EF_{sum}(i, \lambda)} \quad \lambda \in [640nm..850nm] \quad (6-11)$$

方程 6-11 表明, ε 实际上被计算为给定波长处的 SIF 辐射率除以荧光光谱上的 SIF 辐射率积分。 $\varepsilon(1 \times 211)$ 描述了叶片尺度上发射荧光的波谱分布。通过使用 ε , 可以将 SIF_{tot_full} 转换为 $SIF_{tot}(\lambda)$:

$$SIF_{tot}(\lambda) = SIF_{tot_full} \times \varepsilon(\lambda) \quad (6-12)$$

6.1.3.2 将 $SIF_{tot}(\lambda)$ 转换为 $SIF_{toc}(\lambda)$

由于荧光在植被冠层中发生的散射/(再)吸收过程, 只有部分 $SIF_{tot}(\lambda)$ 能够逃逸并被冠层上方的传感器观测到, 该部分荧光为 $SIF_{toc}(\lambda)$ 。荧光逃逸概率(f_{esc})用于确定叶片水平完全发射的荧光能够逃逸出植被冠层并被探测到的概率(Lu et al., 2020), 因此可以基于 f_{esc} 进行冠层顶 SIF 估算:

$$SIF_{toc}(\lambda) = \frac{f_{esc}(\lambda) \times SIF_{tot}(\lambda)}{\pi} \quad (6-13)$$

f_{esc} 由太阳-冠层-传感器几何、叶片光学特性和冠层结构决定。最近的研究(Yang and van der Tol, 2018)表明, 近红外 SIF 的散射/(再)吸收过程可以很好地用近红外反射率来表达。同时, 基于光谱不变理论(Knyazikhin et al., 2011), Zeng 等(2019)研究表明, 近红外的 f_{esc} 可以估算为:

$$f_{esc} = \frac{R_{NIR} \times NDVI}{f_{APAR}} \quad (6-14)$$

式中, R_{NIR} 代表近红外的定向反射率, NDVI 是归一化差异植被指数。在本研究中, f_{APAR}

来自于 DCaPST 模块。

APSIM-SIF 模型的构建和校准示意图如图 6-1 所示。荧光模拟的叶片生理信息由 DCaPST 模块提供，而从叶片水平到冠层水平的荧光升尺度依赖于 ε 和 f_{esc} 。APSIM-SIF 模拟所需的输入包括土壤、天气、品种、作物管理信息和定向反射率的测量值，而 APSIM-SIF 的主要输出为 LAI、地上生物量、冠层光合速率 (A) 和 SIF (例如, SIF_{tot_full} 、 SIF_{tot} 和 SIF_{toc})。LAI (LAI_{obs}) 和地上生物量 ($Biomass_{obs}$) 的观测值可用于校准 APSIM-SIF 模型中的品种参数。此外, DCaPST 模块也可以使用 $A(A_{obs})$ 和遥感的 TOC SIF (SIF_{toc_obs}) 的观测值进行校准。

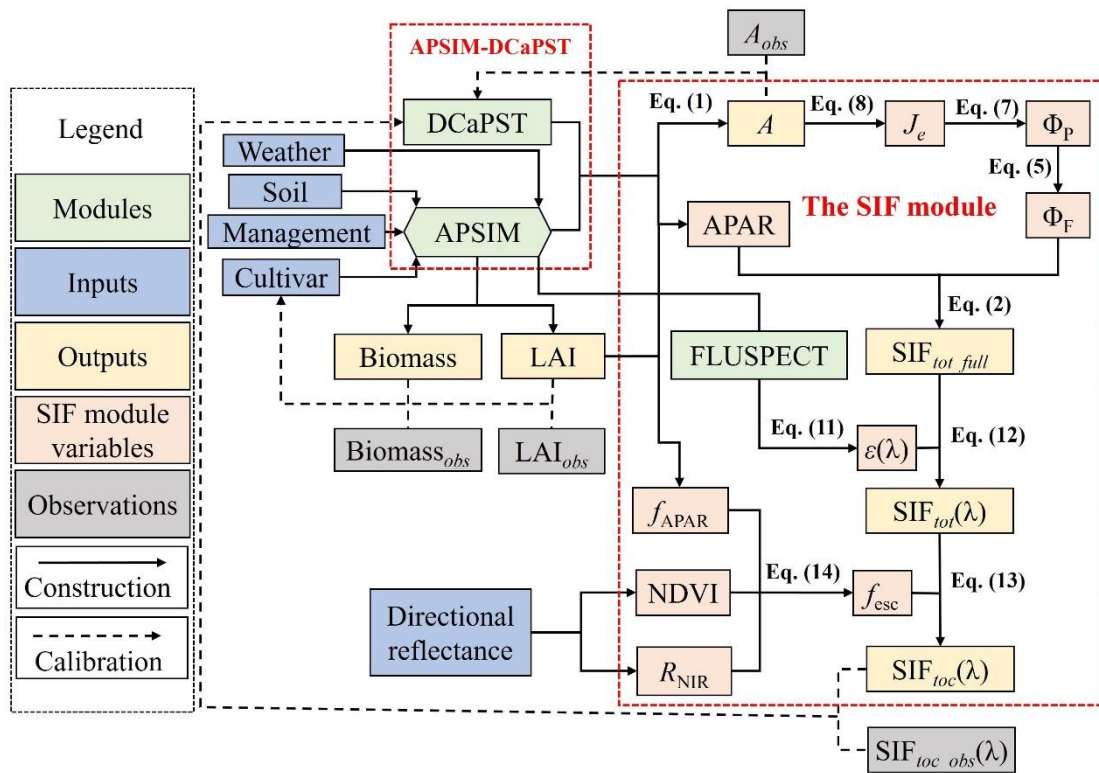


图 6-1 APSIM-SIF 模型的构建和校准流程图。两个红色虚线矩形表示 APSIM-SIF 模型的两个主要组成部分：APSIM-DCaPST 模型和 SIF 模块。

Figure 6-1 Flowchart of the construction and calibration process of the APSIM-SIF model. The two red dashed rectangles represent the two major components of the APSIM-SIF model: the APSIM-DCaPST model and the SIF module.

6.1.4 APSIM-SIF 模拟

为与 TROPOMI SIF 产品匹配，本研究在美国中西部以 7×7 km 的空间分辨率和每日时间步长进行了玉米和大豆的 APSIM-SIF 模拟。基于最近邻方法，进行玉米和大豆的作物栅格重采样，本研究未考虑低农田比例 ($< 10\%$) 的栅格点。总共，本研究获

得了 6114 个玉米栅格点和 5955 个大豆栅格点。本研究利用 APSIM-SIF 进行了三年的模拟，包括一年“预热期”（2017 年）和两年（2018 年和 2019 年）的模拟阶段。区域模拟所需的所有输入都被转换为 APSIM 所需格式，并重采样到 7×7 km 的空间分辨率。

6.2 APSIM-SIF 模型荧光波段转换因子及敏感性分析

6.2.1 SIF 波段转换因子 (ε)

ε 由 FLUSPECT 模型进行估算，该模型需要九个输入参数: Cab, Ccar, Cdm, Cant, Cs, Cw, N, Fqe1 和 Fqe2。其中，Fqe1 通常被认定为常数(Pfündel, 1998)，其他八个输入参数的范围（见表 6-1），参数范围是根据已发表的文献(Liu et al., 2019a; Mousivand et al., 2014; Verrelst et al., 2015)进行确定。然后，根据 Sobol 的随机序列生成器进行了采样。模型模拟数量为 $m \times (p+2)$ ，其中 m 是蒙特卡洛样本的大小（在本研究中 $m = 2000$ ）， p 是要分析的参数数量（ $p = 8$ ）。因此对叶片发出的全波段 SIF 信号（640-850 nm，分辨率为 1 nm）进行了 20000 次模型模拟。FLUSPECT 模型模拟的单波段荧光与宽波段荧光之比与 ε 之间具有强相关性($R^2 = 1.00$) (图 6-2)，因此支持方程 3-11 进行荧光波段转换。图 6-3 显示了在 640–850 nm 波长范围内 ε 的一个示例。在这个示例中，740 nm 处的 ε 约等于 0.012，这意味着 740 nm 处的 SIF 发射(细灰色带)仅占全 SIF 波谱发射量(阴影红色区域)的 1.2%。

表 6-1 FLUSPECT 模型的输入参数以及参数的默认值、最小值和最大值。

Table 6-1 Inputs for the Fluspect model and their minimum and maximum values used in the global sensitivity analysis.

参数	定义	单位	默认值	最小值	最大值
Cab	叶绿素含量	$\mu\text{g cm}^{-2}$	40	0	100
Ccar	类胡萝卜素含量	$\mu\text{g cm}^{-2}$	10	0	30
Cdm	干物质含量	g cm^{-2}	0.012	0	0.050
Cant	花青素含量	$\mu\text{g cm}^{-2}$	0	0	10
Cs	衰老物质分数	-	0	0	0.6
Cw	叶片等效水层	cm	0.009	0	0.040
N	叶片结构参数	-	1.4	1	4
Fqe1	PSI 荧光量子产量	-	0.002	NA	NA
Fqe2	PSII 荧光量子产量	-	0.01	0	0.02

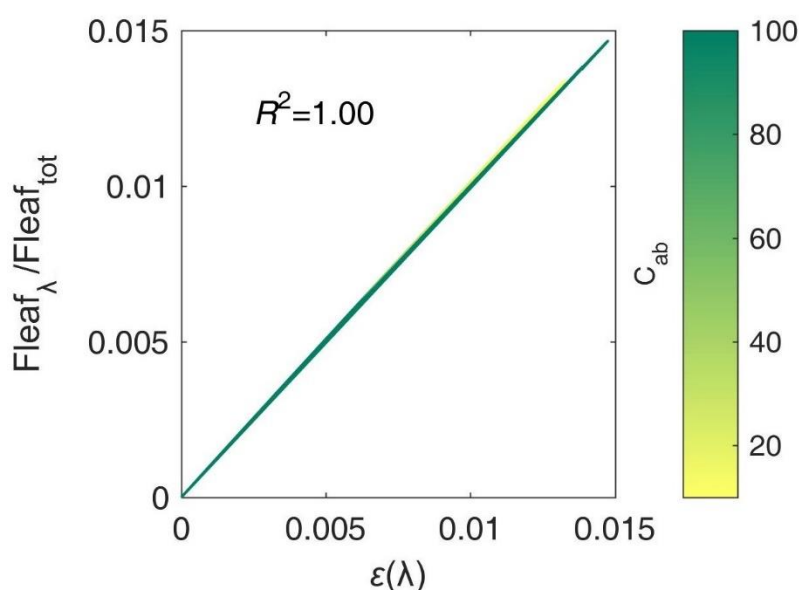


图 6-2 在不同叶绿素含量 (C_{ab} , $\mu\text{g cm}^{-2}$) 下, FLUSPECT 模型模拟的 SIF 带转换因子 (ϵ , nm^{-1}) 和叶片尺度下单波段荧光与全波段荧光比值 ($\text{Fleaf}_\lambda / \text{Fleaf}_{\text{tot}}$) 的比较。 λ 表示 640 到 850 nm 范围内的荧光发射波长。

Figure 6-2 Comparison of SIF band conversion factor (ϵ , nm^{-1}) and ratio of single-band fluorescence to total fluorescence ($\text{Fleaf}_\lambda / \text{Fleaf}_{\text{tot}}$) at leaf scale simulated by FLUSPECT model at different chlorophyll contents (C_{ab} , $\mu\text{g cm}^{-2}$). λ represents the fluorescence emission wavelength in the range of 640 to 850 nm.

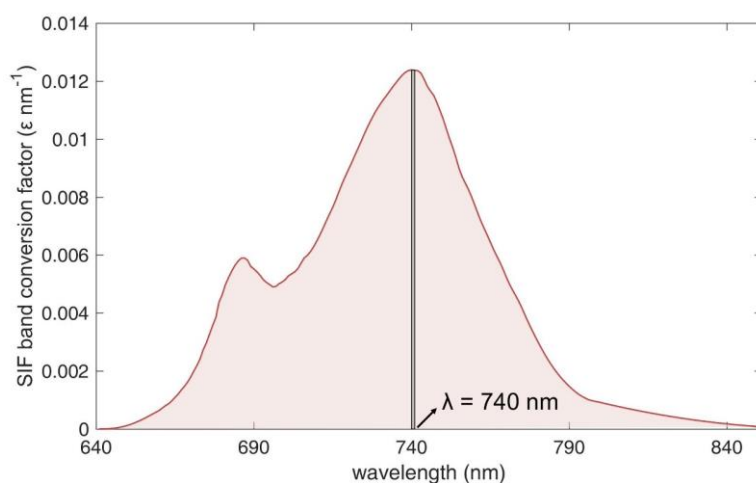


图 6-3 由 FLUSPECT 模型模拟得到的 SIF 波段转换因子 (ϵ , nm^{-1}) 的示例。灰线标记表示 740 nm 波长, 灰线宽度为 1 nm。输入参数设置如下: $C_{ab} = 80 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_{car} = 20 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_{dm} = 0.012 \text{ g cm}^{-2}$, $C_{ant} = 0 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_s = 0$, $C_w = 0.009 \text{ cm}$, $N = 1.4$, $F_{qe1} = 0.002$ 和 $F_{qe2} = 0.01$ 。这些输入变量的定义在正文中提供。

Figure 6-3 An example of the SIF band conversion factor (ϵ , nm^{-1}) simulated by the Fluspect model. The marker indicates the 740 nm wavelength and the gray line has a width of 1 nm. The input parameters were set as follows: $C_{ab} = 80 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_{car} = 20 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_{dm} = 0.012 \text{ g cm}^{-2}$, $C_{ant} = 0 \mu\text{g cm}^{-2}$, $C_s = 0$, $C_w = 0.009 \text{ cm}$, $N = 1.4$, $F_{qe1} = 0.002$ and $F_{qe2} = 0.01$. The definitions of these inputs are provided in the main text.

6.2.2 敏感性分析

图 6-4 展示了在 640-850 nm 波段内模拟得到的 ε 变化范围和 Sobol 敏感性指数结果。 ε 随着波长变化而变化，具有类似 SIF 发射的光谱形状：其在红光峰值（685 nm）和近红外峰值（740 nm）处的平均值分别为 0.0090 nm^{-1} 和 0.0124 nm^{-1} （图 6-4a）。特别地，在常用于遥感 SIF 研究中在 760 nm 的 SIF， ε 为 0.0068 nm^{-1} （图 6-4a），这表明在叶尺度上，760 nm 处的 SIF 辐射仅占宽带 SIF 能量不到 1%。 ε 在两个 SIF 发射峰值处的变异性比较大：在 685 nm 和 740 nm 处的变化范围分别为 0.0042 nm^{-1} - 0.0139 nm^{-1} 和 0.0099 nm^{-1} - 0.0149 nm^{-1} （图 6-4a）。总体而言，在 640-850 nm 的荧光全波段光谱范围内，Cab 和 Fqe2 是 ε 的两个主要驱动因素：两个变量共同解释了超过 90% 的 ε 变异性（图 6-4b）。例如，Cab 和 Fqe2 分别解释了 760 nm 处 ε 变异性的 81% 和 15%。在 680-770 nm 光谱范围内，Cab 单独占 ε 变异性的 60% 以上，其最大贡献为 90.2%，位于 743 nm 处（图 6-4b）。然而，在 770-790 nm 之间，Cab 的影响迅速降低，并且在 790 nm 以外仍然保持约 15%（图 6-4b）。在小于 680 nm 或大于 790 nm 的波长范围内， ε 主要受 Fqe2 的控制（图 6-4b）。其他六个输入变量对 ε 影响很小（图 6-4b）。

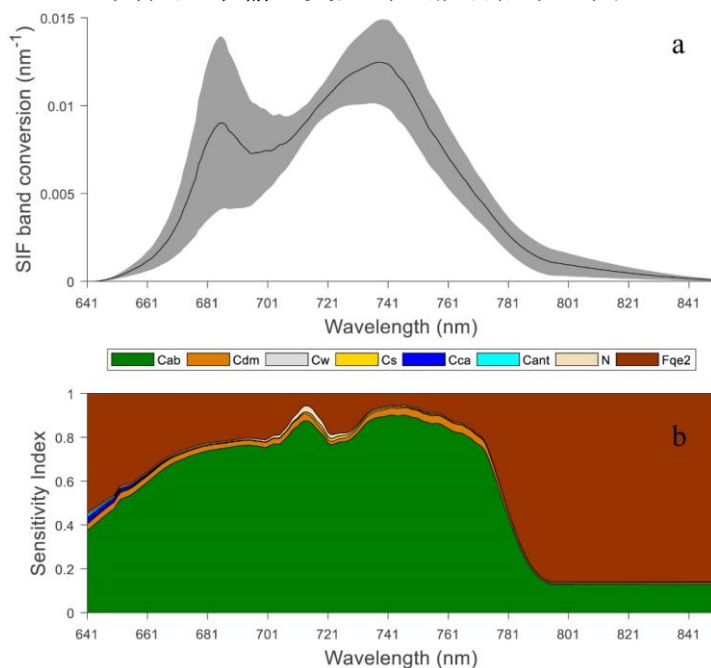


图 6-4 全波段（640-850 nm）的 SIF 波段转换因子（ ε ）的全局敏感性分析结果：（a） ε 的变异性，实线黑线表示所有模型评估（20,000）中的平均 ε 值；实线周围的阴影区域显示了平均值 ± 1.5 标准差，（b）输入变量的 ε 敏感性指数。这些输入变量的定义在正文中提供。

Figure 6-4 Global sensitivity analysis results for the SIF band conversion factor (ε) over the broadband SIF (640–850 nm): (a) the variability of ε , the solid black line represents the mean ε out of all of the model evaluations (20,000); the shaded areas around the solid line show ± 1.5 standard deviations from the mean, (b) the sensitivity indices of the input variables for ε . The definitions of these input variables are provided in the main text.

6.3 APSIM-SIF 模型验证与区域模拟

6.3.1 DCaPST 模块验证

在玉米作物整个生长期, DCaPST 模块模拟的 GPP 与 US-Ne2 站点和 US-Ne3 站点观测的 GPP 相比一致性较高, 平均 R^2 值分别为 0.91 ($RMSE = 2.72 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) 和 0.92 ($RMSE = 3.05 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) (图 6-5a 和 b)。尽管模拟的地上生物量与观测值有很强相关性 ($R^2 > 0.99$), 但 DCaPST 模块在生长后期对生物量有所高估, 误差大约为 1500 kg ha^{-1} , 相对误差小于 7.4% (图 6-5c 和 d)。在这两个站点, DCaPST 模块还解释了超过 90% 的 LAI 变异 (图 6-5e 和 f), 但在高 LAI 情况下有所低估。

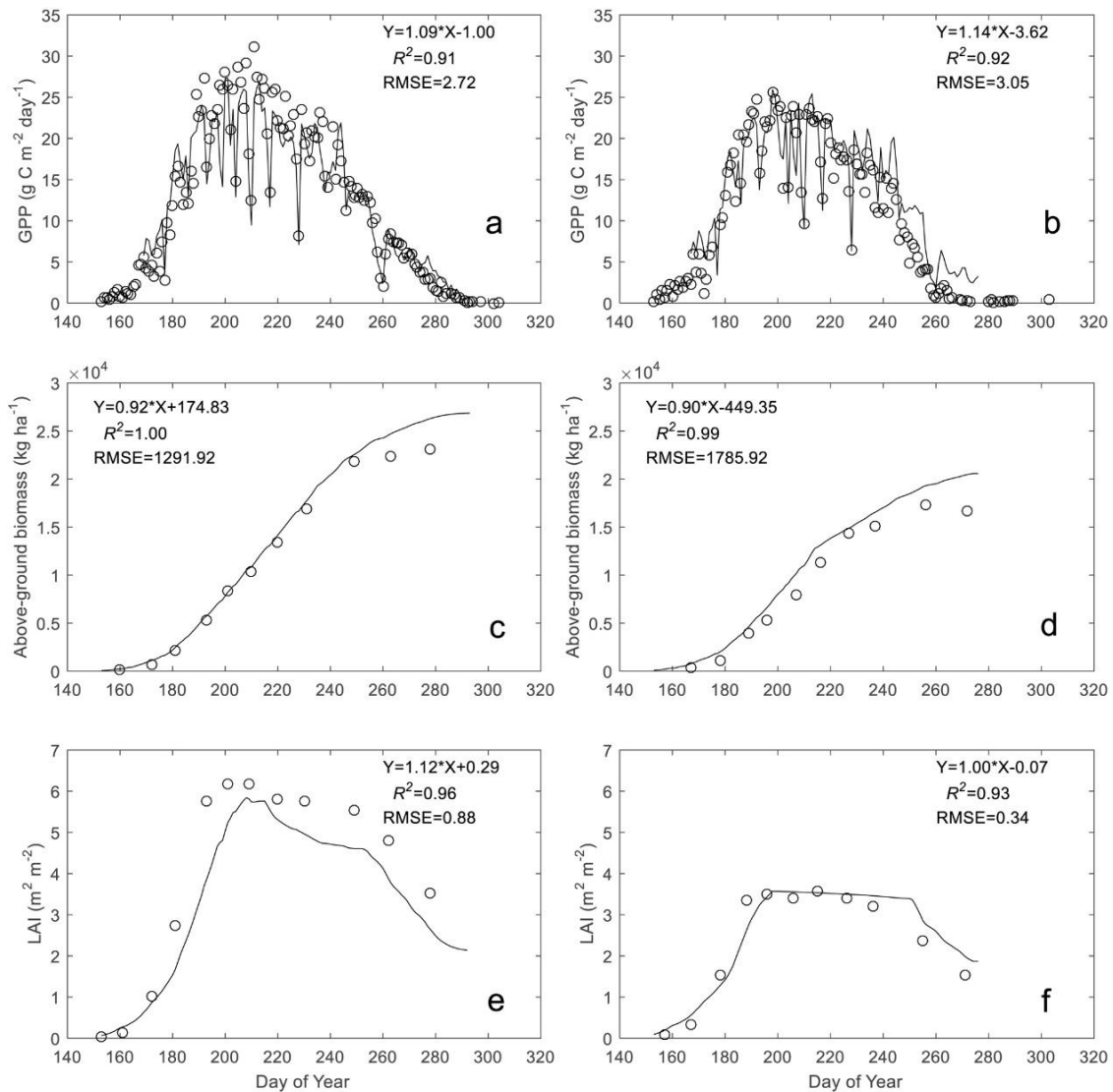


图 6-5 2011 年美国中西部 US-Ne2 和 US-Ne3 站点玉米的每日平均总初级生产力 (GPP, $\text{g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$, a、b)、地上生物量 (kg ha^{-1}) (c、d) 和叶面积指数 (LAI, $\text{m}^2 \text{ m}^{-2}$, e、f) 的观测值 (圆圈) 与 APSIM 模拟值 (线) 进行比较。

Figure 6-5 Observations (circles) of daily mean gross primary productivity (GPP, $\text{g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$, a, b), above-ground biomass (kg ha^{-1}) (c, d), and leaf area index (LAI, $\text{m}^2 \text{ m}^{-2}$, e, f) for maize at US-Ne2 (left column) and US-Ne3 (right column) in 2011 compared with values simulated by APSIM-SIF (lines).

本研究在 Bo1、Br1 和 Ro1 站点进一步评估 DCaPST 模块对玉米和大豆的 GPP 模拟能力 (图 6-6)。在这三个站点, 模拟的 GPP 与观测 GPP 的相关性很好, 模型解释了 GPP 变异的 65% 以上: 在 Bo1、Br1 和 Ro1 分别为 66% ($\text{RMSE} = 5.35 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$)、85% ($\text{RMSE} = 3.46 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) 和 83% ($\text{RMSE} = 3.59 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) (图 6-6a、b、c)。DCaPST 模块也很好地捕捉到大豆作物生长季 GPP 的变化, 分别解释 Bo1、Br1 和 Ro1 三个站点每日 GPP 变异的 64% ($\text{RMSE} = 3.04 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$)、80% ($\text{RMSE} = 2.65 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) 和 71% ($\text{RMSE} = 3.43 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) (图 6-6d、e、f)。

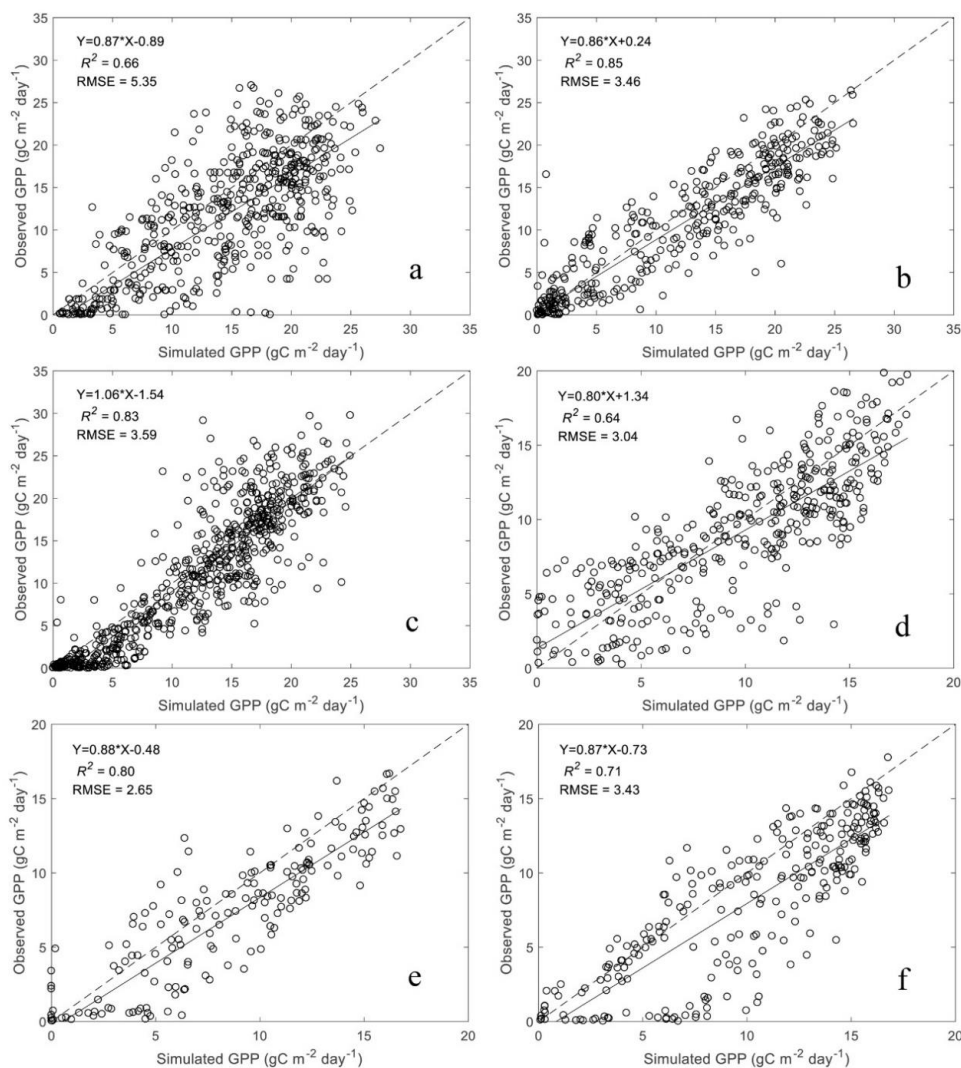


图 6-6 在 Bo1 (a)、Br1 (b) 和 Ro1 (c) 三个站点, 玉米的日均总初级生产力 (GPP) 的观测值和模拟值的比较。使用 APSIM 进行模拟。同时提供这三个站点大豆的比较 (d: Bo1, e: Br1, f: Ro1)。虚线是 1:1 线, 实线表示观测值和模拟值的日均 GPP 之间的线性关系。

Figure 6-6 Comparison of observed and simulated daily mean gross primary productivity (GPP) for maize at Bo1 (a), Br1 (b), and Ro1 (c). Simulations were performed with APSIM-SIF. The comparisons for soybean at these three sites (d: Bo1, e: Br1, f: Ro1) are also provided. The dashed line is the 1:1 line, while the solid line represents the linear relationship between observed and simulated daily mean GPP.

6.3.2 SIF 模块验证

在大满站, APSIM-SIF 模型很好地捕捉了玉米生长的 TOC SIF (图 6-7a) 和 GPP (图 6-7c) 的季节性变化, 其 R^2 值分别为 0.84 ($\text{RMSE} = 0.22 \text{ mW m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 24.68\%$) 和 0.81 ($\text{RMSE} = 2.67 \text{ g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 19.33\%$)。模拟和观测的 TOC SIF 之间的 R^2 随着 LAI 的增加呈上升趋势 (图 6-7b)。在低 LAI 值 ($\text{LAI} < 2$) 下, $\text{SIF}_{\text{toc}_m}$ 解释了 $\text{SIF}_{\text{toc}_o}$ 变异的 51% ($\text{RMSE} = 0.16 \text{ mW m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 32.59\%$), 表明稀疏冠层引起的土壤背景造成模拟的负面效应比较大。相反, 在高 LAI 水平下, $\text{SIF}_{\text{toc}_m}$ 解释了 $\text{SIF}_{\text{toc}_o}$ 变异的 84% ($\text{RMSE} = 0.22 \text{ mW m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 23.49\%$)。本研究还发现, 在 LAI 值较低时, 模型对有些高估 GPP: LAI < 2 时 RRMSE 大于 60% (图 6-7c 和 d)。

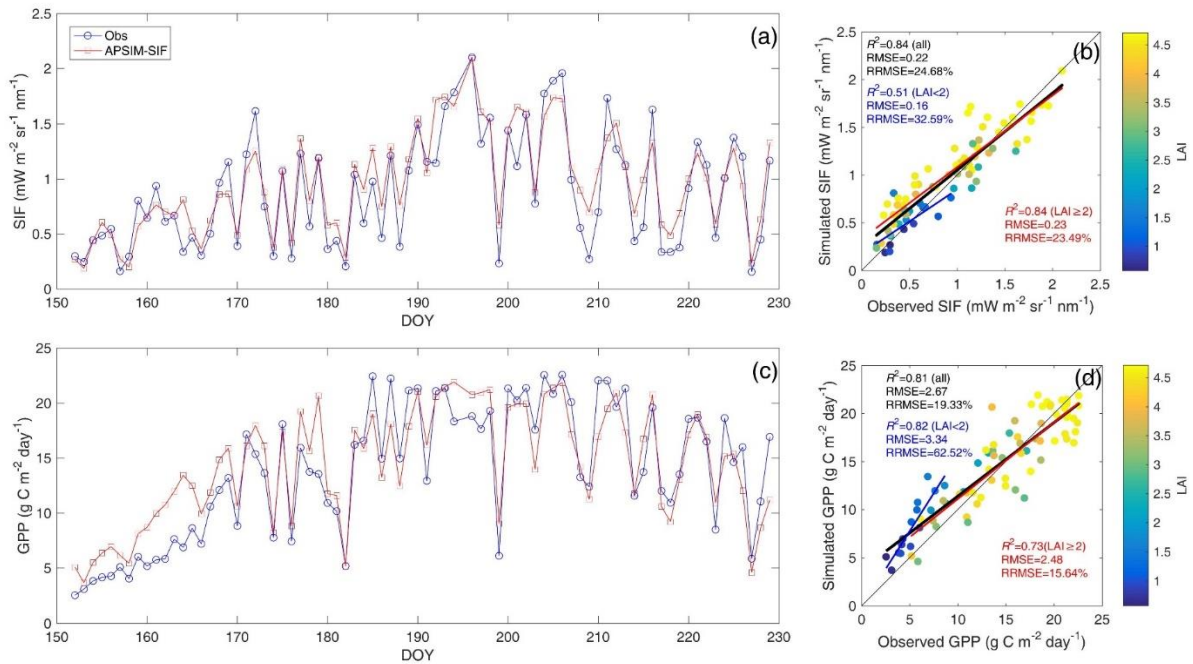


图 6-7 2018 年在大满站通过地面测量和 APSIM-SIF 模拟的日 SIF (a, b) 和 GPP (c, d) 的比较。右图中显示了在不同 LAI 水平下, APSIM-SIF 的决定系数 (R^2), 均方根误差 (RMSE, 对于 SIF 为 $\text{mW m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$, 对于 GPP 为 $\text{g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$) 和相对均方根误差 (RRMSE, %) 的表现。

Figure 6-7 Comparisons of daily SIF (a, b) and GPP (c, d) between ground measurements and simulations from APSIM-SIF at the Daman site in 2018. The performance of APSIM-SIF with the coefficient of determination (R^2), root mean square error (RMSE, $\text{mW m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$ for SIF and $\text{g C m}^{-2} \text{ day}^{-1}$ for GPP), relative root mean square error (RRMSE, %) under different LAI levels is shown in the subplots on the right.

6.3.3 区域模拟

6.3.3.1 SIF_{toc}和 f_{esc} 的变异性

本研究从 TROPOMI SIF 观测中计算出 6 月至 9 月每月的平均冠层顶 SIF 值(SIF_{toc_o}, $\text{mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$) (图 6-8a-d)。本研究还能够从 APSIM-SIF 模拟中获得模拟的冠层顶 SIF (SIF_{toc_m}, 图 6-8e-h)。总体而言, 对于大豆和玉米, SIF_{toc_m} 与 SIF_{toc_o} 大小相当: 夏季(7 月和 8 月, 图 6-8f 和 g) SIF_{toc_m} 与 SIF_{toc_o} 之间最大的差异小于 $0.1 \text{ mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$ (11%), 证实了 SIF_{tot} 和 f_{esc} 的估计相当良好。然而, 9 月份 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 之间的差异增加(图 6-8h): 对于玉米和大豆, SIF_{toc_m} 被低估了 0.16 和 0.13 (分别为 29% 和 25%)。为了进一步评估模拟和观测的 TOC SIF 之间的时间与空间上的相关关系, 本研究对生长季节(6 月至 9 月)研究区域内月平均的 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 进行了经验正交函数(EOF)分析(Sun et al., 2017), 并比较了 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 的正交分量的时间和空间协同性。前两个 EOF(EOF1 和 EOF2)分别解释了 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 变异性的 94% (图 6-9a 和 e) 和 98% (图 6-9b 和 f)。对于第一个主导模式, SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 显示出相似的空间模式, 特别是在玉米带(图 6-9a 和 b)中, 它们之间的 Pearson 相关系数(r) 在玉米(0.73, 图 6-9d) 和大豆(0.63, 图 6-9d) 之间保持较高的一致性。在第二个模式中, SIF_{toc_m} 与 SIF_{toc_o} 的相关性更高($r = 0.78$, 图 6-9e 和 f), 玉米和大豆相关性分别为 0.59 和 0.85(图 6-9h)。第一和第二成分的时间序列也显示出 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 之间的高相似性(图 6-9c 和 g)。总而言之, EOF 分析表明 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 的时空变化高度一致, 表明 APSIM-SIF 模型在模拟区域玉米和大豆的 TOC SIF 方面表现良好。

每日 f_{esc} 值也被合并为月度值(图 6-8i-l)。质量较差的反射率数据可能会导致 f_{esc} 的不确定性较大, 通过采用 $f_{esc} < 0.05$ 和 $f_{esc} > 0.5$ 作为阈值, 约有 2% 的数据被舍弃。玉米在生长季节内具有相对稳定的 f_{esc} , 变化范围为 0.12-0.18 (表 6-2)。玉米的冠层叶倾角在作物发育的早期阶段更加水平, 尽管随着 LAI 的增加, 可能会发生向直立式冠层的转变以避免叶片重叠(Dechant et al., 2020)。由于直立式叶倾角分布方式的 f_{esc} 比平面式叶倾角分布方式小(Zeng et al., 2019), 因此叶倾角分布的这种调整往往会抵消由于 LAI 增加而导致的 f_{esc} 增加, 从而导致玉米 f_{esc} 相对稳定(表 6-2)。相反, 大豆的 f_{esc} 在早期阶段显著增加, 在生长季节的高峰期略有下降: 大豆 f_{esc} 在 6 月达到最大值 0.32 (图 6-8i, 表 6-2), 在 7 月降至 0.21 (图 6-8j, 表 6-2), 并在最后两个月保持几乎不变, 约为 0.13 (图 6-8k 和 l, 表 6-2)。大豆的叶倾角分布在整个生长季节中基本保持直立性, 这可能解释了当冠层闭合时观察到的 f_{esc} 下降模式(表 6-2)。此外, 在 6 月和 7 月, 大豆的 f_{esc} 始终比玉米高: 在 6 月, 大豆 f_{esc} 几乎是玉米 f_{esc} 的两倍(表 6-2)。在衰老阶段, 随着 LAI 的降低, 农田异质性变强, 因此在 1-D 均质假设下得出的 f_{esc} 可能会导致更多的不确定性(Wang et al., 2020; Zhang et al., 2019)。

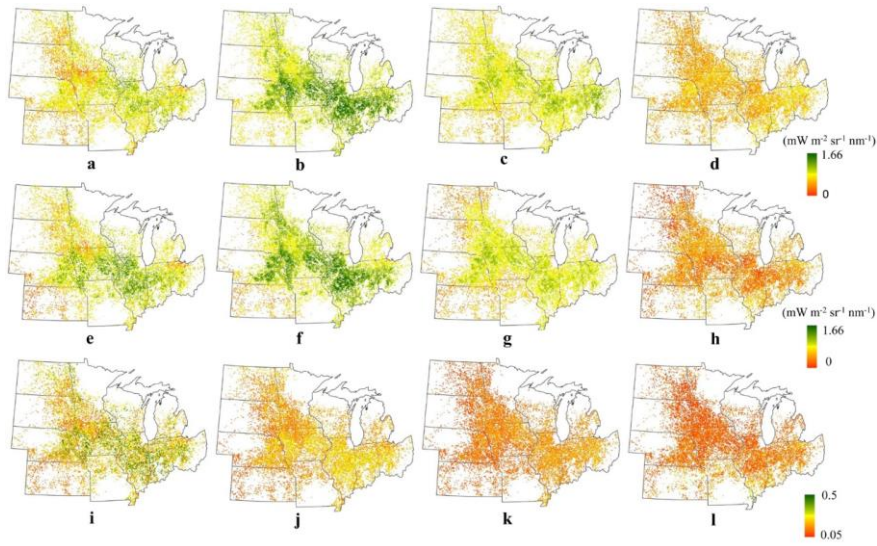


图 6-8 2018 年 6 月至 9 月 TROPOMI 观测提供的月平均冠层顶 740nm SIF (SIF_{toc_o} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$)、由 APSIM-SIF 模型模拟的冠层顶 740nm SIF (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$) 和荧光逃逸概率 (f_{esc})。 (a, e, i)表示 6 月, (b, f, j)表示 7 月, (c, g, k)表示 8 月, (d, h, l)表示 9 月。

Figure 6-8 Monthly mean top-of-canopy SIF emission provided by TROPOMI observations (SIF_{toc_o} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$), top-of-canopy SIF emission simulated by the APSIM-SIF model (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$), and fluorescence escape ratio (f_{esc}) in June (a, e, i), July (b, f, j), August (c, g, k), and September (d, h, l), 2018. SIF_{toc_o} , f_{esc} , and SIF_{toc_m} are for 740 nm.

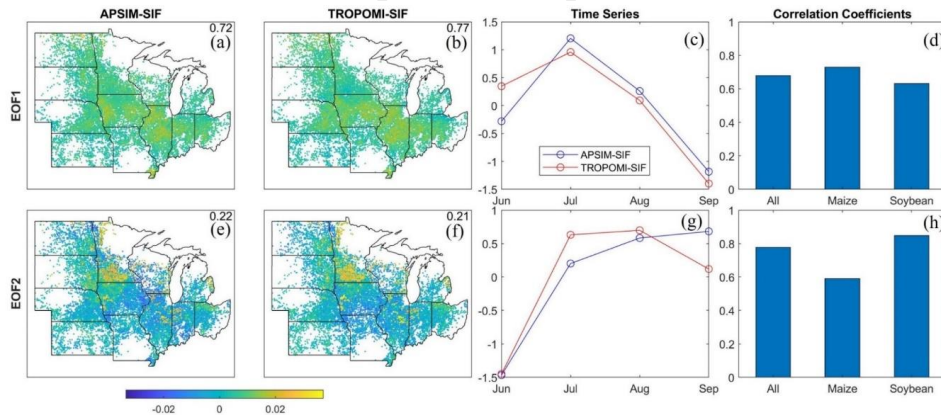


图 6-9 TOC SIF (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$) 的经验正交函数 (EOF) 分解的时空模式, 由 APSIM-SIF 模拟 (a, e) 和来自 TROPOMI 的观测到的 TOC SIF (SIF_{toc_o}) (b, f) 的前两个主导模式。(c, g) 对于这两种模式的相应时间序列。(d, h) SIF_{toc_m} 与 SIF_{toc_o} 和作物类型 (玉米和大豆) 的空间相似度的量化。所有相关系数的 p 值均小于 0.01。子图 (a, e) 和 (b, f) 右上方的百分比值表示相关 EOF 的解释方差。

Figure 6-9 Spatial patterns of empirical orthogonal function (EOF) decomposition of the TOC SIF (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$) simulated by APSIM-SIF (a, e) and observed TOC SIF (SIF_{toc_o}) from TROPOMI (b, f) for the first two leading modes. (c, g) Corresponding time series for the two modes. (d, h) Quantification of the spatial resemblance of SIF_{toc_m} with SIF_{toc_o} and the crop types (maize and soybean). All the correlation coefficients are statistically significant with p -value < 0.01. The percentage values at the top right of panels (a, e) and (b, f) represent the explained variations of the relevant EOF.

表 6-2 APSIM-SIF 模型模拟的玉米 (M) 和大豆 (S) 在 2018 年 6 月、7 月、8 月和 9 月的每日平均荧光逃逸概率 (f_{esc}) 和植被冠层顶 SIF (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$)、太阳辐射 (Rn, $MJ m^{-2} day^{-1}$)、吸收的光合有效辐射的比例 (f_{APAR}) 和叶面积指数 (LAI, $m^2 m^{-2}$) 的平均值和标准差 (在括号内)。SIF_{toc_o} 代表 TROPOMI 提供的每日平均冠层顶 SIF。SIF_{toc_m}、SIF_{toc_o} 和 f_{esc} 为 740nm。

Table 6-2 Daily mean and standard deviations (in parentheses) of fluorescence escape ratio (f_{esc}) and top-of-canopy SIF emission (SIF_{toc_m} , $mW m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$), solar radiation (Rn, $MJ m^{-2} day^{-1}$), fraction of absorbed photosynthetically active radiation (f_{APAR}), and leaf area index (LAI, $m^2 m^{-2}$) of maize (M) and soybean (S) simulated by the APSIM-SIF model for U.S. Midwest in June, July, August, and September 2018. SIF_{toc_o} represents daily mean top-of-canopy SIF emission provided by TROPOMI. SIF_{toc_m}, SIF_{toc_o}, and f_{esc} are for 740 nm.

	6 月		7 月		8 月		9 月	
	M	S	M	S	M	S	M	S
SIF _{toc_o}	0.75 (0.19)	0.80 (0.25)	1.08 (0.24)	1.01 (0.22)	0.80 (0.16)	0.87 (0.19)	0.55 (0.13)	0.51 (0.12)
f_{esc}	0.18 (0.04)	0.32 (0.09)	0.15 (0.03)	0.21 (0.05)	0.14 (0.03)	0.13 (0.03)	0.12 (0.03)	0.13 (0.05)
SIF _{toc_m}	0.78 (0.24)	0.95 (0.29)	1.01 (0.27)	1.00 (0.24)	0.78 (0.21)	0.77 (0.21)	0.39 (0.13)	0.38 (0.14)
Rn	19.98 (1.82)	20.07 (2.58)	21.71 (0.89)	21.84 (0.83)	18.43 (1.10)	18.33 (1.15)	15.81 (1.66)	15.87 (1.71)
f_{APAR}	0.63 (0.06)	0.34 (0.03)	0.92 (0.02)	0.66 (0.03)	0.92 (0.03)	0.94 (0.03)	0.81 (0.05)	0.78 (0.18)
LAI	1.97 (0.42)	0.68 (0.07)	4.67 (0.28)	2.04 (0.19)	4.11 (0.45)	4.99 (0.82)	2.27 (0.42)	2.84 (1.67)

6.3.3.2 农田作物比例对 APSIM-SIF 模型性能的影响

作物整个生长期每日 SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 之间的决定系数 (R^2) 空间分布显示 (图 6-10), APSIM-SIF 在模拟 TOC SIF 时的性能可能会在农田作物比例较小的栅格中变差。例如, 在农田占据大部分区域的州 (如伊利诺伊州和爱荷华州), SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 之间的 R^2 比农田比例较小、碎片化的州 (如堪萨斯州和密苏里州) 高得多 (图 6-10a)。当农田作物比例从 30% 增加到 80% 时 (图 6-10b), SIF_{toc_m} 和 SIF_{toc_o} 之间的 R^2 从 40% 增加到 85% 以上 (图 6-10a)。特别是, 农田作物比例超过 70% 的栅格的 R^2 达到了 0.75 以上, 这些栅格占了总栅格数的约 28%。相比之下, 农田作物比例小于 30% 的栅格的大多数 R^2 值小于 0.5 (图 6-10a 和 b)。

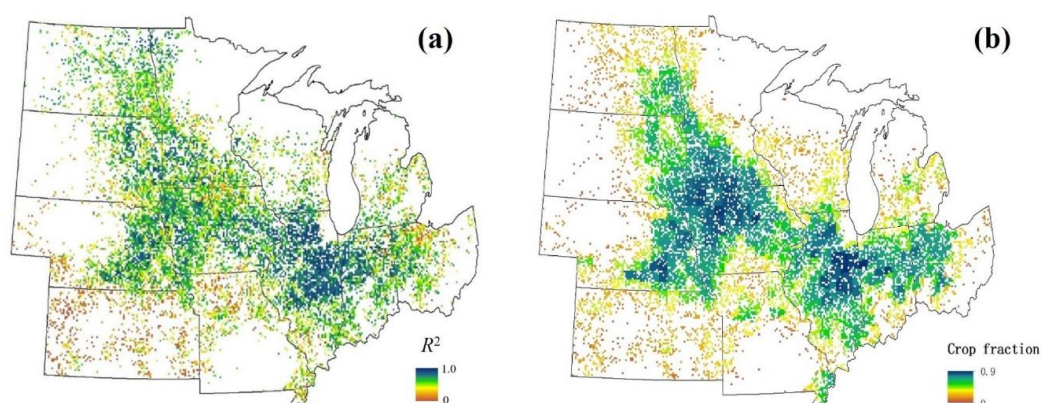


图 6-10 2018 年美国中西部 7×7 公里栅格内，每日模拟和观测 TOC SIF ($\text{mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$) 之间的决定系数 (R^2) (a) 以及农田比例 (b) 的空间分布。

Figure 6-10 The spatial distribution of the coefficient of determination (R^2) between the daily simulated and observed TOC SIF ($\text{mW m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$) (a) and the crop fraction (b) within 7×7 km grid squares across the U.S. Midwest in 2018.

6.4 讨论

6.4.1 从光合作用到 TOC SIF

在先前相关研究中，通过使用一个校正因子 (k) 进行叶片水平到冠层水平的荧光转换，它可以是一个常数或是关于 LAI 或 V_{cmax} 的经验函数，从而将全波段 SIF 辐射转换为窄带 SIF 信号。然而，正如本研究上面所展示的，这种转换涉及两个主要步骤，其物理基础和控制因素非常不同。虽然使用 k 具有较高的计算效率，但其经验性使得难以确定影响 TOC SIF 的关键变量，并可能限制对荧光耦合机制的深入研究。本研究将这种转换机制分解成两个因素：SIF 波段转换因子 (ϵ) 和荧光逃逸概率 (f_{esc})。由于该转换具有明确公式表达，因此任何进一步提高 ϵ 和 f_{esc} 的估计方法都可以应用于改进 APSIM-SIF 的模拟性能。此外，本研究发现近红外 ϵ 主要受叶绿素浓度 (Cab) 的控制，反映了植物状态和生长阶段对荧光波段的影响 (图 6-3)。考虑到在生长高峰季节中 Cab 的变化相对较小，因此可以简化农田冠层近红外波段内的 ϵ 估计。

f_{esc} 代表农田冠层结构对 SIF 信号辐射传输的影响。理论上它是一个包括太阳-冠层-传感器几何和冠层结构参数 (例如叶面积指数和叶片倾角分布) 的复杂函数，因此，如果没有反映植被冠层结构信息的反射率等观测数据的约束，使用简单的经验因子 (例如 k) 可能无法准确地估计 f_{esc} 。最近研究 (Liu et al., 2016; Lu et al., 2020; Yang and van der Tol, 2018; Zeng et al., 2019) 表明，NIR 定向反射率有很好的潜力用来表示 NIR SIF 通过植被冠层的散射/ (再) 吸收过程。换句话说，这些过程对 f_{esc} 的影响是通过 NIR 定向反射率辐射传输过程来隐含考虑的。由于定向反射率与 TOC SIF 同时测量，而大气效应在 NIR 区域受到限制 (Zhang et al., 2019)，因此基于 NIR 反射率的方法具有实际应

用优势。本研究还发现在夏季作物生长期(7月至8月),玉米和大豆为主的农田中, f_{esc} 保持相对恒定。因此,在作物生长季高峰期使用固定值 f_{esc} 是可行的,这同样会简化 APSIM-SIF 模型在农田冠层中的应用。

6.4.2 模型限制

首先,在未来的工作中, ϵ 的计算还有改进的空间。本研究中 FLUSPECT 模拟使用的荧光激发谱分别是从小米(PSI)(Croce et al., 1996)和大麦(PSII)(Franck et al., 2002)的叶绿素溶液提取测量的,它们对其他作物的适用性尚不清楚。此外,本研究还缺乏理解有关这些荧光激发谱是如何应对高温、强光照射、高 VPD 等环境压力,因此需要进行更多的叶片生理实验来进一步评估荧光激发谱应对不同环境条件下的适应能力。其次, f_{esc} 是基于光谱不变理论(Knyazikhin et al., 2011)进行的推导,该理论假设土壤对 TOC 定向反射率的贡献可以忽略不计(即“黑土”)。然而,对于玉米和大豆等行播作物来说,在作物冠层未完全密闭之前,作物株行之间的裸露土壤条带可以对 TOC 反射率产生重要影响(Zhao et al., 2010)。在生长季的早期或晚期 LAI 值较低时,由于土壤背景效应比较强, f_{esc} 可能也会存在很大的不确定性。

6.5 小结

本研究在 APSIM-DCaPST 的框架内开发了 APSIM-SIF 模型。首先根据作物的光合速率估计了叶片水平 SIF 总激发。与以往研究不同的是,本研究将从叶片发射的全波段 SIF 转换为单波段 TOC SIF 的过程分解为两个过程,即 ϵ 和 f_{esc} 。 ϵ 可以在叶片尺度将全波段 SIF 转换到窄带 SIF, 并可以反映出叶片生化生理状态的影响。另一方面, f_{esc} 可以反映冠层结构对 SIF 辐射传递过程的影响。在 NIR 区域, TOC 方向反射率表现出 f_{esc} 估计的潜力。本研究还发现, f_{esc} 在作物生长季节的高峰期保持稳定, 这有助于提高 APSIM-SIF 模型的模拟效率。验证结果表明, APSIM-SIF 可以准确地模拟作物生长季 GPP 和 SIF 的动态变化。本研究强调了农田作物比例对 APSIM-SIF 在区域模拟时性能影响的重要性。该研究有助于理解基于卫星观测的区域尺度上作物光合能力的信号, 同时还需要进一步研究将遥感 SIF 观测与 APSIM-SIF 模型模拟相结合, 以改进作物模型对区域作物产量的模拟。本研究不仅建立了作物光合作用和 SIF 发射之间的机理联系, 还提供了将 SIF 发射整合到农业系统模型中光合作用过程中可行性方案。

第七章 提高 APSIM-SIF 模型干旱胁迫下模拟能力

近年来,日光诱导叶绿素荧光(SIF)在被动遥感方面取得的成功,促使在全球陆地生物圈模型和作物模型中开发和整合冠层级荧光模型,并通过卫星或近地面遥感观测 SIF 和模型模拟 SIF 进行数据融合,用于约束模型内部光合模拟过程,减少模型参数的不确定性。本研究在已经构建的 APSIM-SIF 基础上,结合第三章的 PSI 和 PSII 荧光激发效率分离结果、第四章的干旱胁迫条件下引入 q_L 参数对荧光-光合机理模型的提升以及第五章的荧光逃逸概率估算方法,对 APSIM-SIF 的光合-荧光耦合过程进行改进并对叶片水平荧光模拟能力进行验证。本章研究有三个目标。第一个目标是建立光系统水平的荧光与光合耦合系统,展示和验证基于机理光响应(MLR)方程的荧光-光合耦合方法(J_e 方法)以及传统荧光-光合耦合方法(Φ_F 方法)在作物模型中进行荧光模拟的有效性。第二个目标是对比 J_e 方法与 Φ_F 方法在作物模型进行 SIF 模拟中对参数响应的敏感性及其不同胁迫环境下模拟的 SIF-GPP 响应关系。第三个目标是检验 J_e 方法在胁迫环境下相比 Φ_F 方法在作物模型进行 SIF 耦合的优势。模型改进重点是从叶片尺度降尺度到光系统尺度进行荧光建模,并检验光合-荧光耦合模型在多种胁迫环境条件下的模拟性能。为了消除冠层结构和观测方向的影响,本研究模拟的重点是叶片水平的总荧光,以便可以更全面地研究光合-荧光耦合生理过程。为了获得叶片水平的总荧光,本研究基于光谱不变理论方法估算的荧光逃逸概率将遥感卫星观测(TROPOMI)的冠层顶方向性荧光转为叶片水平的总荧光并与基于 MLR 方程改进的 APSIM-SIF 模型模拟的叶片水平的总荧光结果进行比较,从而证明改进的 APSIM-SIF 模型在干旱胁迫下模拟的有效性。本研究提供一个从光系统尺度进行光合-荧光耦合框架,有助于提高生态系统模型与 SIF 耦合机理性。

7.1 APSIM-SIF 改进方法

7.1.1 PSII 荧光建模方法

在这项研究中,本研究提出了两种不同的方法来进行光系统水平荧光建模,两种方法均是由光合 CO_2 同化速率出发,用于计算 PSII 荧光光量子通量密度($\text{SIF}_{\text{tot_PSII_PPFD}}$, $\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{s}^{-1}$)。第一种方法被称为基于 Φ_F 方法,直接利用吸收的光合有效辐射(APAR, $\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{s}^{-1}$)和荧光量子产量(Φ_F)来估计 $\text{SIF}_{\text{tot_PSII_PPFD}}$, Φ_F 与光化学量子产量(Φ_P)以及 NPQ 速率系数(k_N)有关(Van der Tol 等人, 2014)。第二种方法被称为基于 J_e 方法,利用实际电子传递速率(J_e , $\mu\text{mol e}^- \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$)与 PSII 反应中心开放程度(q_L)来计算 $\text{SIF}_{\text{tot_PSII_PPFD}}$ (Gu 等人, 2019)。基于这两种方法计算 $\text{SIF}_{\text{tot_PSII_PPFD}}$ 的一般流程如图 7-1 所示。

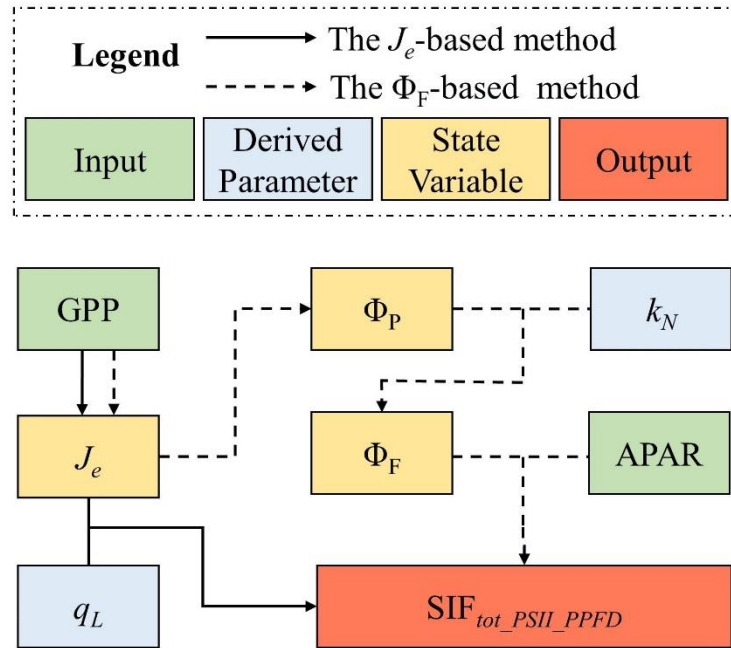


图 7-1 光系统水平 SIF 建模流程图。实线和虚线分别表示基于 J_e 方法和基于 Φ_F 方法的流程。GPP: 总初级生产力 ($\mu\text{mol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); J_e : 电子传递速率 ($\mu\text{mol e}^- \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); q_L : PSII 反应中心开放程度; Φ_P : 光化学量子产量; Φ_F : 荧光量子产量; k_N : 非光化学淬灭速率常数; APAR: 吸收的光合有效辐射 ($\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); SIF_{tot_PSII_PPFD}: PSII 荧光光子通量密度 ($\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$)。

Figure 7-1 Flowchart of the SIF modeling approaches at the photosystem level. The solid and dashed line represent the flow process for the J_e -based and the Φ_F -based methods, respectively. GPP: gross primary productivity ($\mu\text{mol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); J_e : electron transport rate ($\mu\text{mol e}^- \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); q_L : the fraction of the PSII reaction centers; Φ_P : photochemical quantum yield; Φ_F : fluorescence quantum yield; k_N : rate coefficient for non-photochemical quenching yield; APAR: absorbed photosynthetically active radiation ($\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$); SIF_{tot_PS_PPFD}: the total SIF emission at the photosystem level with the unit of photons ($\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{ s}^{-1}$).

在光合作用模型中实际电子传递 (J_e) 与 GPP 密切相关, 并受到环境因素以及光呼吸和光合途径的动力学过程的影响(Guan et al., 2016)。由于 C_3 植物和 C_4 植物之间的电子利用效率不同, J_e 可以近似为:

$$J_e = \begin{cases} EFF_{C_4} \times GPP & C_4 \text{ plants} \\ EFF_{C_3} \times GPP \times \frac{C_i + 2\Gamma^*}{C_i - \Gamma^*} & C_3 \text{ plants} \end{cases} \quad (7-1)$$

式中, EFF_{C_4} ($= 5$) 和 EFF_{C_3} ($= 4.8$) 是 C_4 和 C_3 作物的有效电子利用效率。 Γ^* 是

CO₂ 补偿点 (Pa), C_i 是胞间二氧化碳浓度 (Pa)。

基于 Φ_F 方法是一种常用的荧光建模方法, 已被集成到许多陆地生物圈模型中 (Parazoo et al., 2020)。在 APSIM-SIF 最初版本中使用基于 Φ_F 方法进行叶片尺度荧光与光合系统建模, 在光系统上需要考虑到分配到光系统 I 和光系统 II 的能量分配比例, 因此 $SIF_{tot_PSII_PPFD}$ 可以表示为:

$$SIF_{tot_PSII_PPFD} = APAR \times \beta_{II} \times \frac{k_F}{k_F + \frac{(1+\beta)x^\alpha}{\beta+x^\alpha} \times k_{No} + k_D} \left(1 - \frac{J_e}{J_o} \Phi_{PSII_{max}} \right) \quad (7-2)$$

式中, APAR 表示吸收的光合有效辐射 ($\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{s}^{-1}$), β_{II} ($= 0.5$) 是分配给 PSII 的 APAR 的分数; k_F 和 k_D 分别是叶绿素荧光和本构热耗散速率常数, Van der Tol 等(2014)建议 $k_F = 0.05$, $k_D = \max(0.03T_{air} + 0.0073, 0.87)$, T_{air} 为空气温度; 拟合参数 k_{No} (2.58)、 α (2.83) 和 β (0.114) 由 Van der Tol 等(2014)提供; J_o ($\mu\text{mol e}^- \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$) 表示最大潜在电子传递速率; $\Phi_{PSII_{max}}$ 是 PSII 的最大光化学量子产量; $x = 1 - \Phi_P / \Phi_{PSII_{max}}$ 量化光化学速率反馈的强度, 从 0 (以完全效率运行) 到 1 (完全被反馈阻断) 变化 (Van der Tol et al., 2014)。

基于 J_e 方法是一种新型的光合荧光耦合机理模型。从 PSII 到 PSI 的实际电子传递速率 (J_e) 作为连接光合 CO₂ 同化速率和光系统叶绿素荧光的纽带。将 $SIF_{tot_PSII_PPFD}$ 与 J_e 联系的方程如下所示 (Gu et al., 2019):

$$SIF_{tot_PSII_PPFD} = \frac{J_e \times (1 - \Phi_{PSII_{max}})}{q_L \times \Phi_{PSII_{max}} \times (1 + k_{DF})} \quad (7-3)$$

式中, $k_{DF} = k_D / k_F$, k_{DF} ($= 9$) 由实验观测得到 (Liu et al., 2022b)。 q_L 表示 PSII 反应中心开放程度。目前, PAR 对 q_L 的一阶变化可由指数方程进行计算 (Han et al., 2022), q_L 可以表示为:

$$q_L = a_{qL} \exp(-b_{qL} \times PAR) \quad (7-4)$$

式中, a_{qL} 和 b_{qL} 是经验拟合系数。在这里, 本研究使用 Han 等(2022)对作物的拟合结果: $a_{qL} = 0.77$, $b_{qL} = 4.9 \times 10^{-4}$ 作为 C₃ 作物的系数, $a_{qL} = 0.89$, $b_{qL} = 5.0 \times 10^{-4}$ 作为 C₄ 作物的系数。

7.1.2 PSII 到光系统水平总荧光转换

利用基于光系统 I (PSI) 和光系统 II (PSII) 的对光系统总荧光的相对贡献比例, 将 $SIF_{tot_PSII_PPFD}$ 转换为光系统水平的总荧光发射 (SIF_{tot_PS} , $mW\ m^{-2}$)。特定波段的光系统水平总荧光可以通过 PSI 和 PSII 的荧光激发谱表示:

$$SIF_{tot_PS}(\lambda) = SIF_{tot_PSI_rad} \times \varphi_I(\lambda) + SIF_{tot_PSII_rad} \times \varphi_{II}(\lambda) \quad (7-5)$$

式中, λ (nm) 为波长, $SIF_{tot_PSI_rad}$ ($mW\ m^{-2}$) 和 $SIF_{tot_PSII_rad}$ ($mW\ m^{-2}$) 分别是带有辐射能量单位的 PSI 和 PSII 的总荧光。 φ_I 和 φ_{II} 分别表示 PSI 和 PSII 的荧光激发谱, 其中 φ_I 来自(Croce et al., 1996), φ_{II} 来自(Franck et al., 2002)。

SIF_{tot_PS} 以辐射能量单位 ($mW\ m^{-2}$) 可以转换为光量子通量密度 (PPFD, $\mu mol\ photons\ m^{-2}\ s^{-1}$), 以 1 nm 分辨率进行全波段 (640-850 nm) 荧光 PPFD 单位转换:

$$\begin{aligned} SIF_{tot_PSII_PPFD} &= SIF_{tot_PSII_rad} \sum_{\lambda=640}^{850} \left(\varphi_{II}(\lambda) \times \frac{\lambda \times 10^6}{h \times c \times N_A \times 10^3 \times 10^9} \right) \\ SIF_{tot_PSI_PPFD} &= SIF_{tot_PSI_rad} \sum_{\lambda=640}^{850} \left(\varphi_I(\lambda) \times \frac{\lambda \times 10^6}{h \times c \times N_A \times 10^3 \times 10^9} \right) \end{aligned} \quad (7-6)$$

式中, $SIF_{tot_PSII_PPFD}$ 和 $SIF_{tot_PSI_PPFD}$ 分别是来自 PSII 和 PSI 的荧光光量子通量密度 (640-850 nm), 单位为 $\mu mol\ photons\ m^{-2}\ s^{-1}$; h 为普朗克常数 ($6.63 \times 10^{-34}\ J \cdot s$), c 为光速 ($3 \times 10^8\ m\ s^{-1}$), N_A 为阿伏伽德罗常数 ($6.02 \times 10^{23}\ mol^{-1}$)。 10^3 、 10^9 和 10^6 用于将单位从 mW 转换为 W、从 nm 转换为 m 和从 mol 转换为 μmol 。

根据荧光量子产量的定义即每吸收单位光子释放的荧光光子数量, $SIF_{tot_PSII_PPFD}$ 和 $SIF_{tot_PSI_PPFD}$ 的比值为:

$$\frac{SIF_{tot_PSI_PPFD}}{SIF_{tot_PSII_PPFD}} = \frac{APAR \times \beta_I \times \Phi_{F_PSI}}{APAR \times \beta_{II} \times \Phi_{F_PSII}} \quad (7-7)$$

式中, β_I ($= 0.5$) 和 β_{II} ($= 0.5$) 分别表示分配给 PSI 和 PSII 吸收的 PAR 的比例。 Φ_{F_PSI} 和 Φ_{F_PSII} 分别表示 PSI 和 PSII 的荧光量子产量。由(Pfündel, 1998)以及第四章研究结果表明在短期光照条件变化下, Φ_{F_PSI} 通常是恒定不变的, 参考(Liu et al., 2019a)和第四章研究结果 Φ_{F_PSI} 设为 0.005。 Φ_{F_PSII} 受到快速光强变化的影响, 并包含光合生理信息。

将公式 7-6 合并到公式 7-7 中, 可以获得 $SIF_{tot_PSI_rad}$ 与 $SIF_{tot_PSII_rad}$ 的比值为:

$$\frac{SIF_{tot_PSI_rad}}{SIF_{tot_PSII_rad}} = \frac{\beta_I \times \Phi_{F_PSI} \times \sum_{\lambda=640}^{850} (\varphi_{II}(\lambda) \times \lambda)}{\beta_{II} \times \Phi_{F_PSII} \times \sum_{\lambda=640}^{850} (\varphi_I(\lambda) \times \lambda)} \quad (7-8)$$

结合公式 7-5, 公式 7-6 和公式 7-8, 消去 $SIF_{tot_PSI_rad}$, 光系统水平 SIF_{tot_PS} 可以表示为:

$$SIF_{tot_PS}(\lambda) = SIF_{tot_PSII_PPFD} \frac{\left(\varphi_{II}(\lambda) + \frac{\beta_I \times \Phi_{F_PSI} \times \varphi_I(\lambda) \times \sum_{\lambda=640}^{850} (\varphi_{II}(\lambda) \times \lambda)}{\beta_{II} \times \Phi_{F_PSII} \times \sum_{\lambda=640}^{850} (\varphi_I(\lambda) \times \lambda)} \right)}{\sum_{\lambda=640}^{850} \left(\varphi_{II}(\lambda) \times \frac{\lambda \times 10^6}{h \times c \times N_A \times 10^3 \times 10^9} \right)} \quad (7-9)$$

7.1.3 光系统水平荧光到叶片水平荧光转换

SIF 光子从光系统到叶片表面的辐射传输过程取决于叶片内部色素浓度以及叶绿体结构参数, 可以通过 FLUSEPCT 模型进行模拟, 进而计算叶片与光系统水平荧光光谱的比例 (ε)。通过各个荧光波段 $\varepsilon(\lambda)$ 将光系统水平荧光转换到叶片水平荧光 (SIF_{tot} , $mW m^{-2} nm^{-1}$), 因此 SIF_{tot} 可以表示为:

$$SIF_{tot}(\lambda) = SIF_{tot_PS}(\lambda) \times \varepsilon(\lambda) \quad (7-10)$$

式中, ε 表示光系统水平到叶片水平转换因子, ε 考虑了荧光在叶片中的散射和再吸收过程的影响。为了计算 ε , 本研究使用了 FLUSPECT 模型(Vilfan et al., 2016)模拟的叶片荧光激发矩阵 (EF 矩阵)。这些 EF 矩阵 (351×211) 将太阳激发光谱 (400-750nm) 转换为荧光激发谱 (640-850nm), 分辨率为 1nm。具体而言, ε 表示为叶片表面发射的荧光光谱与光系统最初产生的荧光光谱之比:

$$\varepsilon(\lambda_f) = \frac{E(\lambda_e) \left(M_{b,PSI}(\lambda_e, \lambda_f) + M_{b,PSII}(\lambda_e, \lambda_f) + M_{f,PSI}(\lambda_e, \lambda_f) + M_{f,PSII}(\lambda_e, \lambda_f) \right)}{E(\lambda_e) \left(M_{PSI}(\lambda_e, \lambda_f) + M_{PSII}(\lambda_e, \lambda_f) \right)} \quad (7-11)$$

式中, λ_e 和 λ_f 分别为激发光波长 (400-750 nm) 和荧光波长 (640-850 nm)。E (1×351) 是太阳入射光谱 (400-750nm, $\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$)。b 和 f 分别表示由叶片上表面的上行荧光以及叶片下表面的下行荧光。 $M_{b,PSI}$ 、 $M_{b,PSII}$ 、 $M_{f,PSI}$ 、 $M_{f,PSII}$ 是四个 EF 矩阵 (351×211), 分别表示 PSI 上行激发矩阵、PSII 上行激发矩阵、PSI 下行激发矩阵、PSII 下行激发矩阵。 M_{PSI} 和 M_{PSII} 分别是 PSI 和 PSII 的光系统初始层 EF 矩阵。 ε 的形状取决于叶片结构和生化参数, 包括叶绿素含量 (C_{ab} , $\mu\text{g cm}^{-2}$)、类胡萝卜素含量 (C_{car} , $\mu\text{g cm}^{-2}$)、干物质含量 (C_{dm} , g cm^{-2})、花青素含量 (C_{ant} , $\mu\text{g cm}^{-2}$)、衰老物质分数 (C_s)、叶片等效水层参数 (C_w , cm) 以及叶片结构参数 (N)。

7.1.4 冠层荧光逃逸概率估算

由于冠层对 SIF 重吸收和散射效应, 仪器探测到的冠层顶 SIF 仅占冠层内所有叶片发出的荧光的一部分。SIF_{tot} 可以通过观测到的冠层顶 SIF (SIF_{toc}, $\text{mW m}^{-2} \text{nm}^{-1} \text{sr}^{-1}$) 和荧光逃逸概率 (f_{esc}) 进行转换 (Lu et al., 2020), 公式如下:

$$\text{SIF}_{tot} = \frac{\pi \times \text{SIF}_{toc}}{f_{esc}} \quad (7-12)$$

基于光谱不变理论, 在近红外波段的 f_{esc} 可以通过近红外反射率 (R_{NIR})、归一化差异植被指数 (NDVI) 和冠层吸收的光合有效辐射比例 (f_{APAR}) 进行估算 (Zeng et al., 2019):

$$f_{esc} = \frac{R_{NIR} \times \text{NDVI}}{f_{APAR}} \quad (7-13)$$

NDVI 可用 R_{NIR} 和红光波段反射率 (R_{RED}) 计算得到:

$$\text{NDVI} = \frac{R_{NIR} - R_{RED}}{R_{NIR} + R_{RED}} \quad (7-14)$$

f_{APAR} 可以用宽动态范围植被指数 (WDRVI) (Gitelson et al., 2014) 估计, WDRVI (Wide Dynamic Range Vegetation Index) 是一种用于评估植被覆盖度的指数。它是根据经典的 NDVI 计算方法在分子和分母上加入了新的参数, 从而扩大了数据范围和动态范围, 提高了数据灵敏度和可靠性。相比于其他植被指数如 NDVI, WDRVI 不仅可

以在更广泛的数据范围内应用，而且可以更好地反映不同植被类型的相对植被盖度，如林地、草地、农田、沙漠等。在作物冠层覆盖度较高的情况下，使用 WDRVI 指数可以更准确地估算 FPAR，从而更加全面、准确地反映植被生长状态和动态变化情况。WDRVI 公式是：

$$\text{WDRVI} = \frac{0.1R_{\text{NIR}} - R_{\text{RED}}}{0.1R_{\text{NIR}} + R_{\text{RED}}} \quad (7-15)$$

f_{APAR} 与 WDRVI 呈线性关系(Liu et al., 2021):

$$f_{\text{APAR}} = 0.516 \times \text{WDRVI} + 0.726 \quad (7-16)$$

由此估算得到 f_{esc} 可以通过冠层顶观测到的反射率进行计算，反映了冠层结构相关信息。

7.2 APSIM-SIF 模型的评估

7.2.1 GPP 模拟评估

由于光合生产力模拟是进行荧光模拟的基础，本研究通过站点 GPP 数据对 APSIM-SIF 模拟的光合速率 (GPP) 进行评估。图 7-2 显示 APSIM-SIF 模型分别对玉米和大豆生长季 GPP 的模拟与通量观测结果对比，结果显示 APSIM-SIF 模型可以很好的捕捉到作物生长季 GPP 的季节变化 ($R^2 > 0.87$)。两种作物生长季 GPP 变化均呈钟形曲线，玉米在 DOY = 190 天时生长达到顶峰而大豆在 DOY = 220 时处于旺盛生长期，整体上玉米生长时期要长于大豆作物生长时期 (图 7-2)。APSIM-SIF 模型能够模拟玉米和大豆作物的生长时期以及生长高峰期 GPP 大小的变化，模型检验指标说明观测与模拟 GPP 对于玉米作物 ($R^2 = 0.94$, $\text{RMSE} = 4.29 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 20.43\%$) (图 7-2a) 效果优于大豆作物 ($R^2 = 0.88$, $\text{RMSE} = 3.95 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$, $\text{RRMSE} = 22.52\%$) (图 7-2b)，在大豆的生长后期 APSIM-SIF 模拟的 GPP 偏高 (图 7-2b)。总的来说，APSIM-SIF 模型能够准确模拟不同作物季节性每日 GPP 的变化。

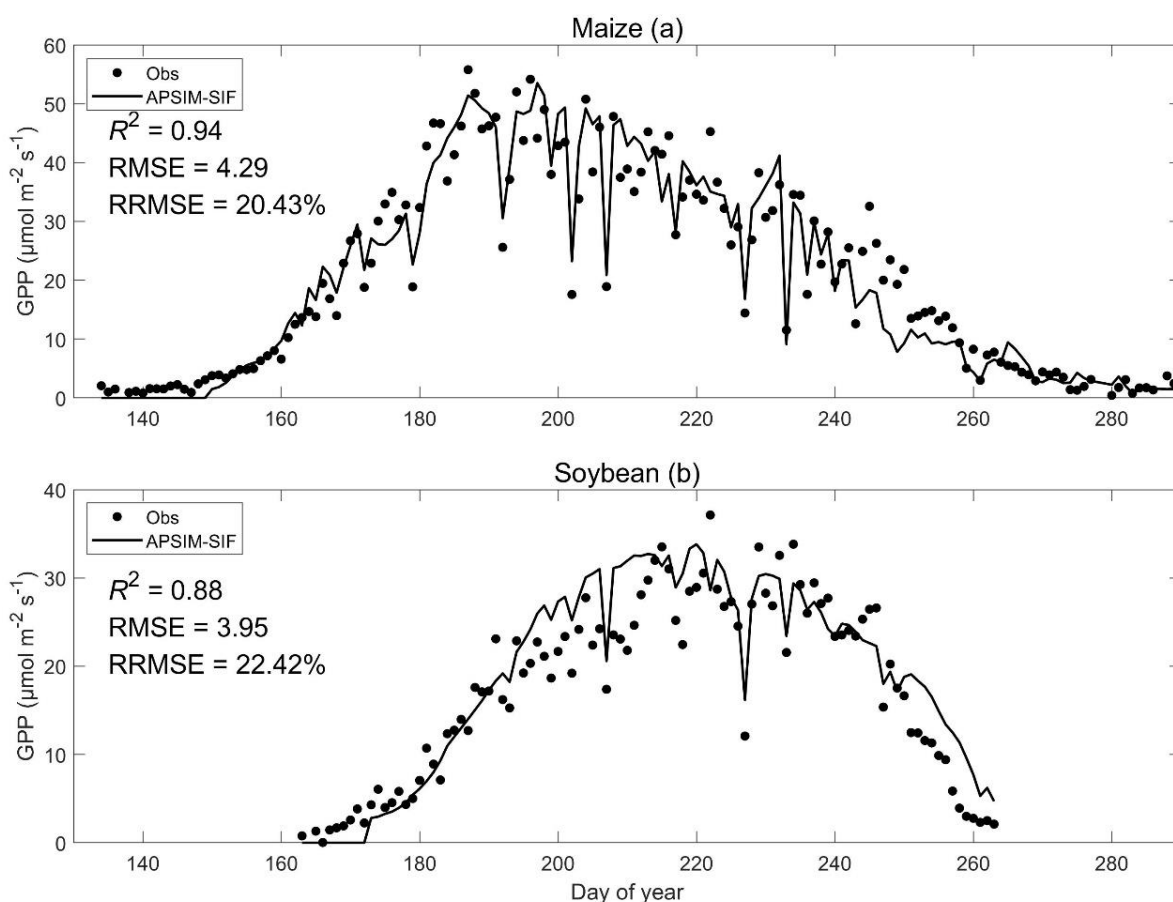


图 7-2 APSIM-SIF 对玉米 (a) 和大豆 (b) 在冠层水平上每日总初级生产力 (GPP , $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) 的模拟和观测比较。

Figure 7-2 The comparison between ground measurements and simulations from APSIM-SIF for daily Gross Primary Productivity (GPP , $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) at the canopy level for maize (a) and soybean (b).

7.2.2 SIF_{tot} 模拟评估

在玉米和大豆站点，本研究评估 APSIM-SIF 模型对 SIF_{tot} 模拟表现，同时比较两种荧光建模方法（基于 J_e 和基于 Φ_F 的方法）模拟效果的不同（图 7-3）。结果表明，APSIM-SIF 模型模拟与玉米和大豆作物生长季的观测的 SIF_{tot} 相关性非常好。对于玉米作物，基于 J_e 方法和 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 与观测值相比， R^2 分别为 0.92（图 7-3a）、0.94（图 7-3c）。对于大豆作物，模拟的 SIF_{tot} 与观测的 SIF_{tot} 仍有较高的相关性：基于 J_e 方法的 R^2 值为 0.90（图 7-3b），基于 Φ_F 方法的 R^2 值为 0.92（图 7-3d）。结果表明，APSIM-SIF 模型中使用的两种荧光耦合方法都可以捕获到作物生长季 SIF_{tot} 季节变化模式，表明这两种方法都可以在 APSIM-SIF 模型中使用进行作物生长季 SIF_{tot} 模拟。

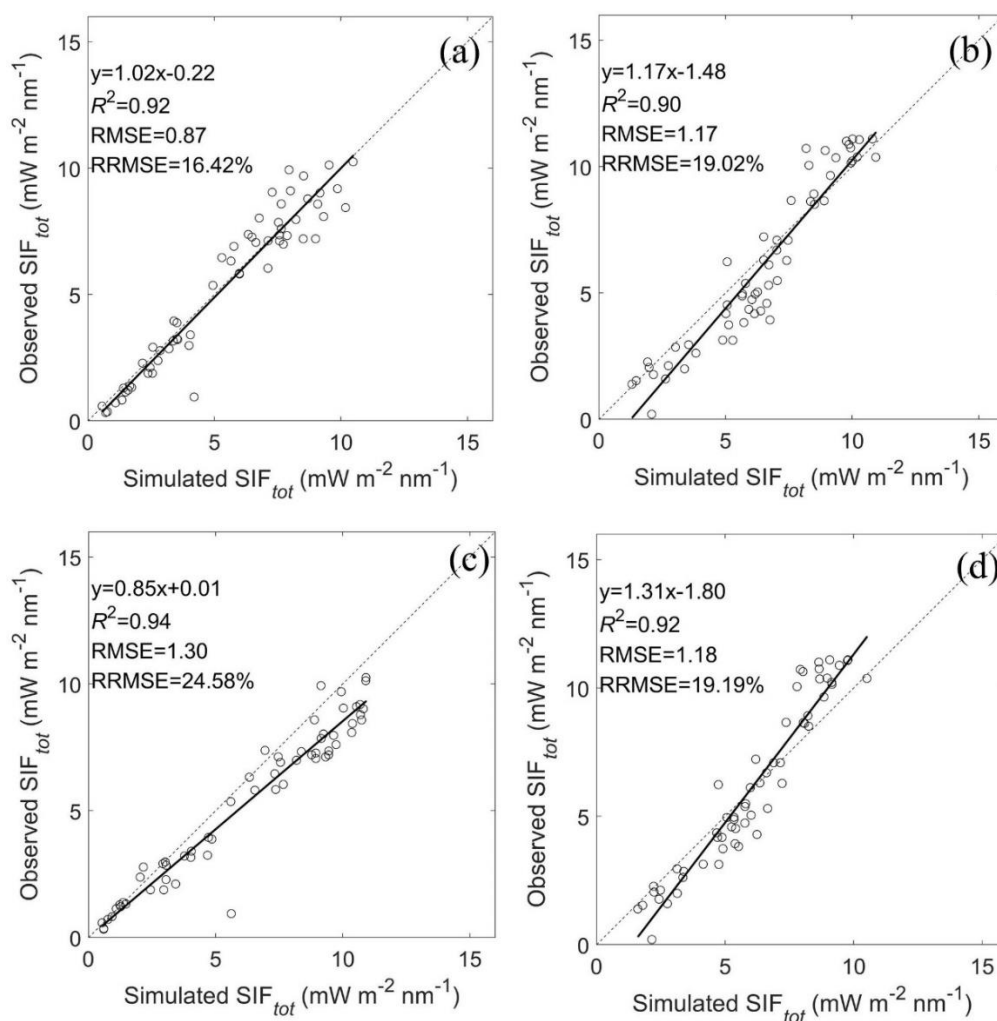


图 7-3 比较模拟与观测的玉米 (a, c) 和大豆 (b, d) 的冠层总 SIF (SIF_{tot} , $mW m^{-2} nm^{-1}$), APSIM-SIF 模型使用基于 J_e 的方法 (a, b) 和基于 Φ_F 的方法 (c, d) 的进行 SIF_{tot} 模拟。

Figure 7-3 The comparisons of the total SIF emission from all leaves (SIF_{tot} , $mW m^{-2} nm^{-1}$) between ground measurements and simulations from the APSIM-SIF model using the J_e -based method (a, b) and the Φ_F -based method (c, d), respectively, for maize (a, c) and soybean (b, d) at the canopy level.

7.3 基于两种荧光建模方法的 APSIM-SIF 模型模拟比较

7.3.1 SIF_{tot} 模拟的敏感性分析结果

本研究对 SIF_{tot} 的模拟进行敏感性分析, 以确定不同荧光建模方法中影响 SIF_{tot} 的模拟的关键参数。图 7-4 显示了整个作物生长季节中 SIF_{tot} 的 Sobol 总灵敏度指数 (S_{Ti}) 变化结果。两种荧光建模方法所模拟的 SIF_{tot} 对冠层结构和叶片生理的参数的 S_{Ti} 不同生长阶段差异明显。对于基于 Φ_F 方法的 APSIM-SIF 模拟敏感性结果 (图 7-4a), 本研究发现叶片生理参数 χ_{SLN} 和 χ_{Jmax} 以及冠层结构变量 ALA 和 k_D 都对 SIF_{tot} 模拟有重要

的影响，这四个参数占 SIF_{tot} 变异性的 86.4%。在作物不同生长阶段，参数的敏感程度不同。具体来说，在作物生长前期（DOY = 180 之前），ALA 对 SIF_{tot} 的影响最大，影响程度超过 50%，这是由于在 LAI 比较低时 ALA 的变化对 APAR 影响较大。随着作物生长，叶片生理参数（ χ_{SLN} 和 χ_{Jmax} ）的敏感程度显著增加，而 ALA 和 k_D' 等冠层结构参数仍然可以解释 20% 以上的 SIF_{tot} 变异。在作物生长高峰期时，叶片生理参数敏感程度超过冠层结构参数的敏感性，这说明光合生理导致的 Φ_F 变化在作物生长高峰期影响更大。

对于基于 J_e 方法的敏感性分析结果显示影响 SIF_{tot} 变异的主要参数是叶片生理参数 χ_{SLN} 和 χ_{Jmax} （图 7-4b），这两个参数解释超过 60% 的 SIF_{tot} 变异，而其他有较大影响的叶片生理参数如 χ_{Vcmax} 和 SLN_{top} 则占了总变异的 20.6%。与基于 Φ_F 方法不同，冠层结构参数 ALA 和 k_D' 在解释 SIF_{tot} 变异方面起到了很小的作用，在作物生长季节中只解释了不到 10% 的 SIF_{tot} 变异（图 7-4b）。这说明基于 J_e 的方法在模拟 SIF_{tot} 时更多地依赖于叶片生理参数，而非冠层结构参数，主要是由于基于 J_e 方法模拟的 SIF 与光合生理过程如电子传输速率更为相关，因此使得模拟的 SIF_{tot} 更易受到光合生理的影响。在整个生长季中对 SIF_{tot} 影响的最大冠层结构变量是 ALA，在 DOY = 237 时达到了 25.3%（图 7-4b）。但是，其余冠层结构参数对 SIF_{tot} 的影响非常弱，在作物生长季节中仅解释了 SIF_{tot} 变异的 3.2%。综上所述，在基于 J_e 方法下，超过 70% 的 SIF_{tot} 变异可以归因于冠层光合生理过程参数的变化。而对于基于 Φ_F 的方法，生理参数对 SIF_{tot} 变异可以达到 50% 以上，但是冠层结构变量仍然有 20% 以上影响程度。这表明基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 在作物生长时期主要是受控于光合生理过程参数（ χ_{SLN} ）；而基于 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 在生长前期对冠层结构参数（ALA）响应敏感而生长中后期则对光合生理过程和冠层结构参数（ χ_{SLN} ）均响应敏感。

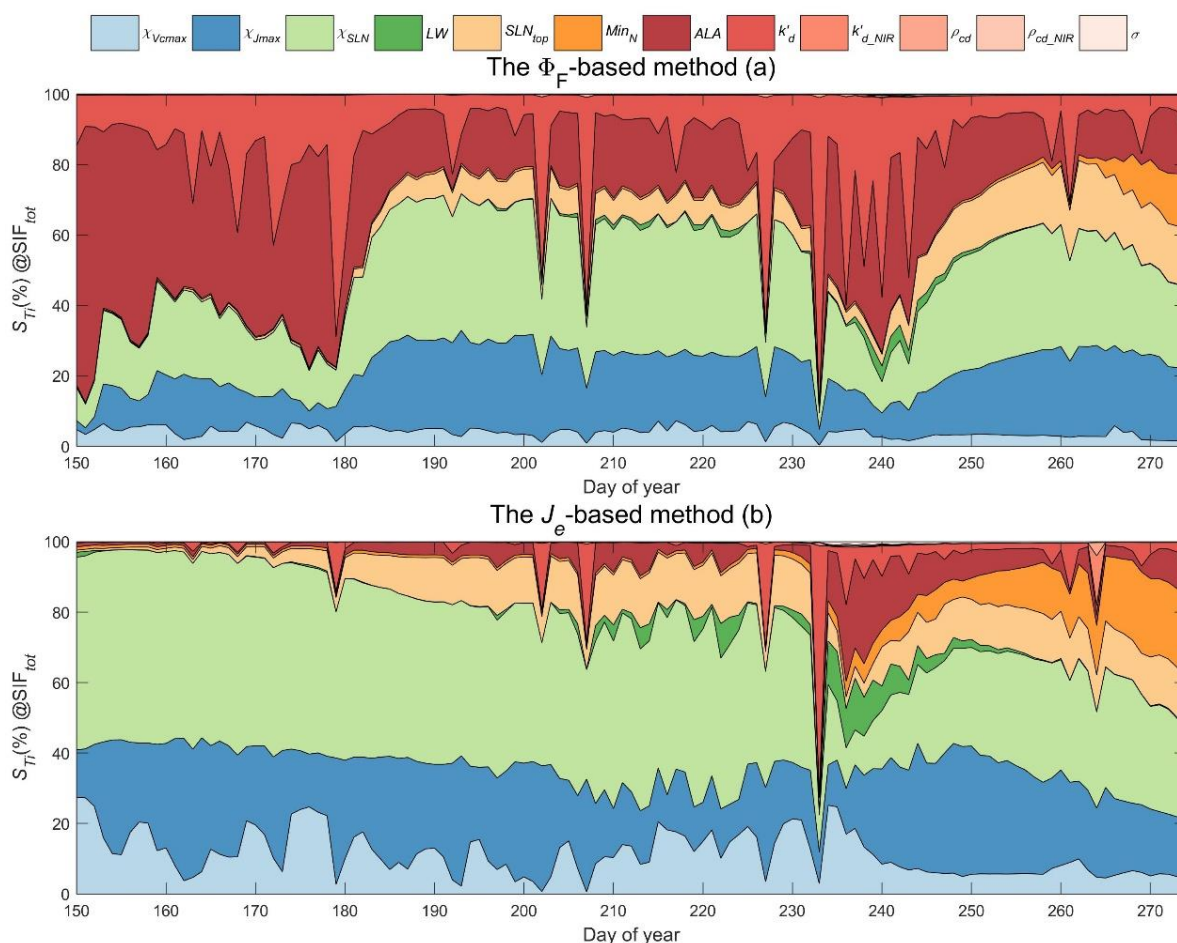


图 7-4 基于 Φ_F 方法 (a) 和基于 J_e 方法 (b) APSIM-SIF 模拟 SIF_{tot} 的 Sobol' 总灵敏度指数 (S_{Ti}) 随作物生长时期的变化。

Figure 7-4 Sobol' total sensitivity index (STi) for APSIM-SIF SIF_{tot} (760 nm) given all the DCaPST module variables and the SIF modeling approaches the Φ_F -based method (a), and the J_e -based method (b).

7.3.2 不同情境下 GPP 和 SIF_{tot} 线性关系变化

使用 APSIM-SIF 模型模拟不同情景下作物生长季中 GPP 和 SIF_{tot} 的线性关系的变化, 其线性回归决定系数 (R^2) 如图 7-5 所示。结果表明, 基于 J_e 的方法模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 的 R^2 高于基于 Φ_F 的方法, 尤其是在 LAI 比较高 ($LAI > 2$) 的情况下 (图 7-5c)。在生长季节中的未受到胁迫条件下, SIF_{tot} 和 GPP 相关性非常强, 其中基于 J_e 方法的 R^2 范围为 0.90-0.93, 而基于 Φ_F 方法的 R^2 范围为 0.81-0.83。然而, 在干旱胁迫条件下, 基于 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 和 GPP 线性关系明显下降, R^2 降低为 0.67-0.75, 而基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 和 GPP 仍然表现较强的线性相关, R^2 值范围为 0.86-0.87。当 LAI 较低 ($LAI < 2$) 时 (图 7-5b), 两种 SIF 建模方法模拟的 SIF_{tot} 能够解释 GPP 变异的 90% 以上, 除了干旱条件下 CK 处理的基于 Φ_F 方法表现比较差 ($R^2 = 0.59$)。当 $LAI > 2$ (图 7-5c) 时, 基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 之间的线性关系比基于 Φ_F 方法更强

(ΔR^2 范围为 0.08 至 0.31)。然而,在干旱条件下,基于 J_e 方法和基于 Φ_F 方法模拟 SIF_{tot} 与 GPP 的关系都会降低,其中基于 Φ_F 方法模拟的线性关系要弱得多 ($R^2 < 0.62$)。本研究还发现,在干旱条件下,基于 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系在 ALA 和/或 SF 变化会有所提高。此外,与正常情况相比,温度升高或者降雨减少也会导致 SIF_{tot} 和 GPP 之间的线性关系也会下降。以上结果表明基于 Φ_F 方法,在高 LAI 以及干旱条件下,如果冠层结构和叶片生理都没有明显改变时,作物冠层的 GPP 和 SIF_{tot} 线性关系会有明显降低,而通过冠层叶倾角的调整或者光合生理胁迫程度的增加,GPP 与 SIF_{tot} 的线性关系会增加,这主要是由于基于 Φ_F 方法对 APAR 响应敏感,在干旱胁迫下 GPP 会明显降低,如果冠层结构没有发生变化,则由于模型模拟未考虑干旱胁迫下叶倾角的变化因此 APAR 改变不大,而 Φ_F 本身在胁迫下变化幅度比较小,因此使得模拟的 SIF_{tot} 在干旱胁迫下仍然比较高, SIF_{tot} 与 GPP 呈现非线性关系,如果在模型中调整叶倾角的变化(叶倾角增加)使得 APAR 降低,会使得 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系增强。而基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 对光合电子传递速率响应更为敏感,因此 GPP 的下降使得电子传递速率降低,也会导致 SIF_{tot} 下降,从而在不改变叶倾角的情况下也可使得 SIF_{tot} 与 GPP 在干旱胁迫下有更好的线性关系。综上所述,不同荧光建模方法会导致模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系在干旱胁迫下有较大的不同,基于 Φ_F 方法需要考虑到冠层叶倾角以及光合胁迫因子的变化从而改善模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系,而基于 J_e 方法则从光合生理上建立了 SIF_{tot} 与 GPP 直接关系,无需通过冠层叶倾角进行纠正。

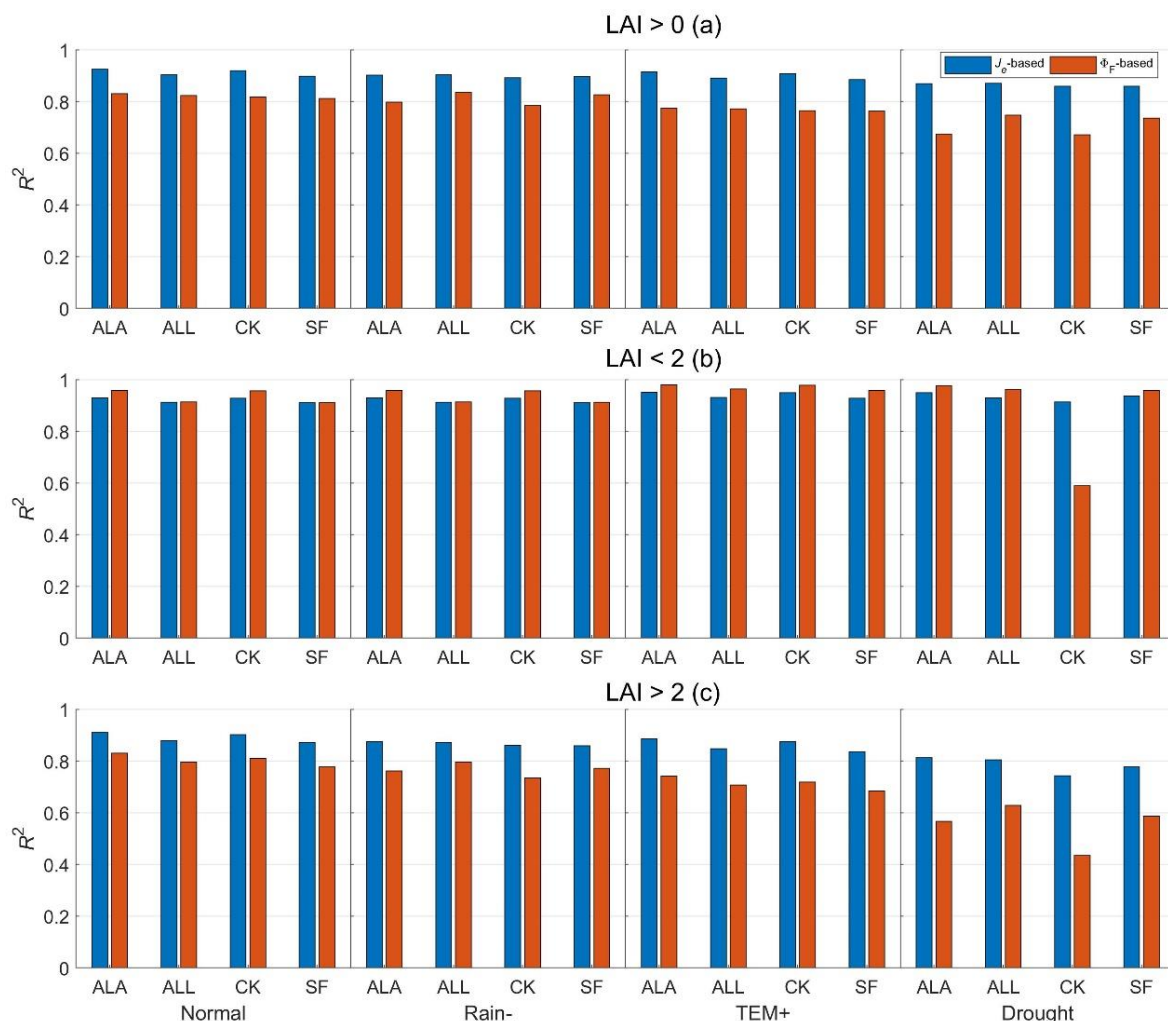


图 7-5 在不同情景下基于 Φ_F 方法和基于 J_e 方法 APSIM-SIF 模拟 GPP 和 SIF_{tot} 线性关系 $LAI > 0$ (a), $LAI < 2$ (b) 以及 $LAI > 2$ (c)。“Normal”表示空气温度或降雨没有变化,“Rain-”表示降雨减少,“TEM+”表示空气温度升高,“Drought”表示降雨减少同时空气温度升高。ALA、SF、ALL、CK 分别表示冠层叶倾角变化、光合胁迫胁迫因子变化、叶倾角和光合胁迫因子同时发生变化、叶倾角和光合胁迫因子不发生变化。

Figure 7-5 The coefficients of determination (R^2) between GPP and SIF_{tot} as simulated by the APSIM-SIF model with two different modeling approaches, for various scenario simulations under different LAI values: $LAI > 0$ (a), $LAI < 2$ (b) and $LAI > 2$ (c). The "Normal" scenario indicates no changes in air temperature or rainfall, "Rain-" indicates a decrease in rainfall, "TEM+" indicates an increase in air temperature, and "Drought" indicates both a decrease in rainfall and an increase in air temperature. Additionally, four modes of antagonistic regulation for the crop under varied environmental conditions are considered: ALA, ALL, CK, and SF. ALA represents only an increase in average leaf angle, SF represents only a decrease in specific leaf nitrogen-dependent stress factor, ALL represents an increase in average leaf angle and a decrease in specific leaf nitrogen-dependent stress factor, and CK represents no changes in either ALA or SF.

7.3.3 不同干旱程度 APSIM-SIF 模拟的 SIF_{tot} 比较

为了评估使用不同 SIF 建模方法的 APSIM-SIF 模拟作物生长期 SIF 对干旱胁迫的响应能力, 本研究比较不同干旱年份下模拟 SIF_{tot} 与卫星 SIF 观测 SIF_{tot} 之间的季节性变化。模拟结果如图 7-6 所示, 使用基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 对干旱响应更敏感。在正常或轻度干旱年份下 (图 7-6a, b), 两种 SIF 建模方法模拟的 SIF_{tot} 与观测的 SIF_{tot} 之间存在很好的一致性。然而, 在生长期后期的发生中度干旱时, 基于 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 在干旱发生时并没有发生明显变化, 而 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 在干旱发生时明显下降, 与观测 SIF_{tot} 变化趋势一致 (图 7-6c)。此外, 基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 在整个生长期持续的干旱条件下与观测 SIF_{tot} 在趋势和大小方面更为一致 (图 7-6d)。因此, 在干旱胁迫条件下, 基于 J_e 方法相比 Φ_F 方法, 更能够捕捉的季节性干旱对 SIF_{tot} 的影响。

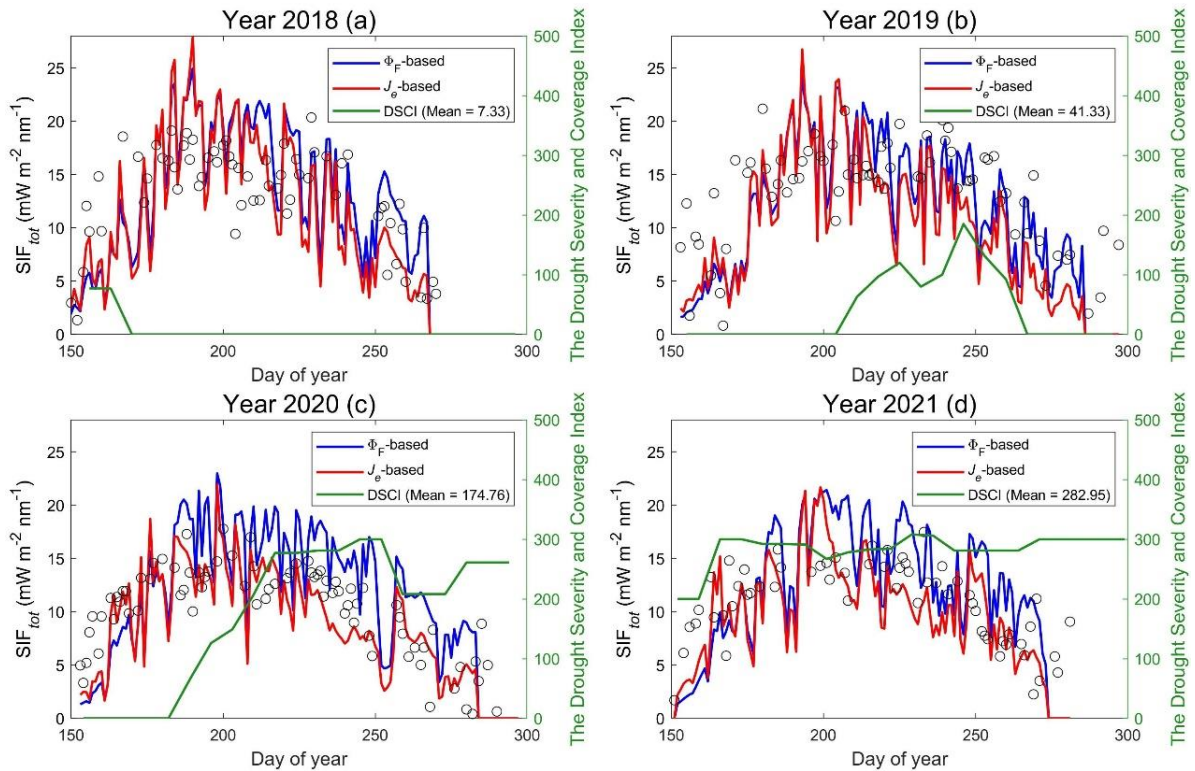


图 7-6 2018-2021 年在 Brooks Field 站点基于 Φ_F 方法 (蓝线) 和 J_e 方法 (红线) 的 SIF_{tot} ($mW m^{-2} nm^{-1}$, 743 nm 处) 的模拟结果以及 TROPOMI 观测值 (黑色圆圈)。干旱严重度和覆盖指数 (DSCI, 绿线) 表示干旱严重程度级别。

Figure 7-6 Model simulated by the Φ_F -based method (blue line) and the J_e -based method (red line) and TROPOMI-derived (black circles) daily SIF_{tot} ($mW m^{-2} nm^{-1}$, at 743 nm) at the Brooks Field (41.97°N, 93.69°W) site for each year from 2018 to 2021 (a - d). The Drought Severity and Coverage Index (DSCI, green line) represents the drought levels for an area from the U.S. Drought Monitor map.

7.3.4 不同荧光建模方法 APSIM-SIF 产量模拟比较

在遥感 SIF 约束下, 利用 APSIM-SIF 模型进行区域玉米产量模拟, 并与 NASS 的县级玉米统计产量按照不同的州和年份进行对比 (图 7-7)。结果显示: 在所有年份和州的组合中, 基于 J_e 的方法比基于 Φ_F 的方法模拟的作物产量与县域统计产量相关性更高。基于 J_e 方法的相关系数范围为 0.21 到 0.78, 预测误差在 748-2061 kg ha⁻¹ 之间(图 7-7); 而基于 Φ_F 的方法的相关系数范围为-0.19 到 0.61, 预测误差在 1239-2068 kg ha⁻¹ 之间(图 7-7)。采用基于 J_e 方法仅在少数州和年份中(图 7-7c)模拟的玉米产量略高于县域统计产量, 而采用基于 Φ_F 方法在大多数州和年份下都显著低估作物产量。基于 J_e 方法和 Φ_F 方法模拟的作物产量在 2019 年的印第安纳州表现最差(图 7-7j), 模拟产量与观测产量相关系数低于 0.25 甚至为负数, 该年份州的 NASS 报告作物产量明显低于其他年份, 说明 2019 年印第安那州可能遭受了极端气候事件, 从而导致 APSIM-SIF 模拟能力下降, 这主要是由于模型本身对极端气候考虑不足。综合以上结果表明, 在 SIF 对 APSIM-SIF 模拟作物产量约束方面基于 J_e 的方法明显优于基于 Φ_F 的方法。

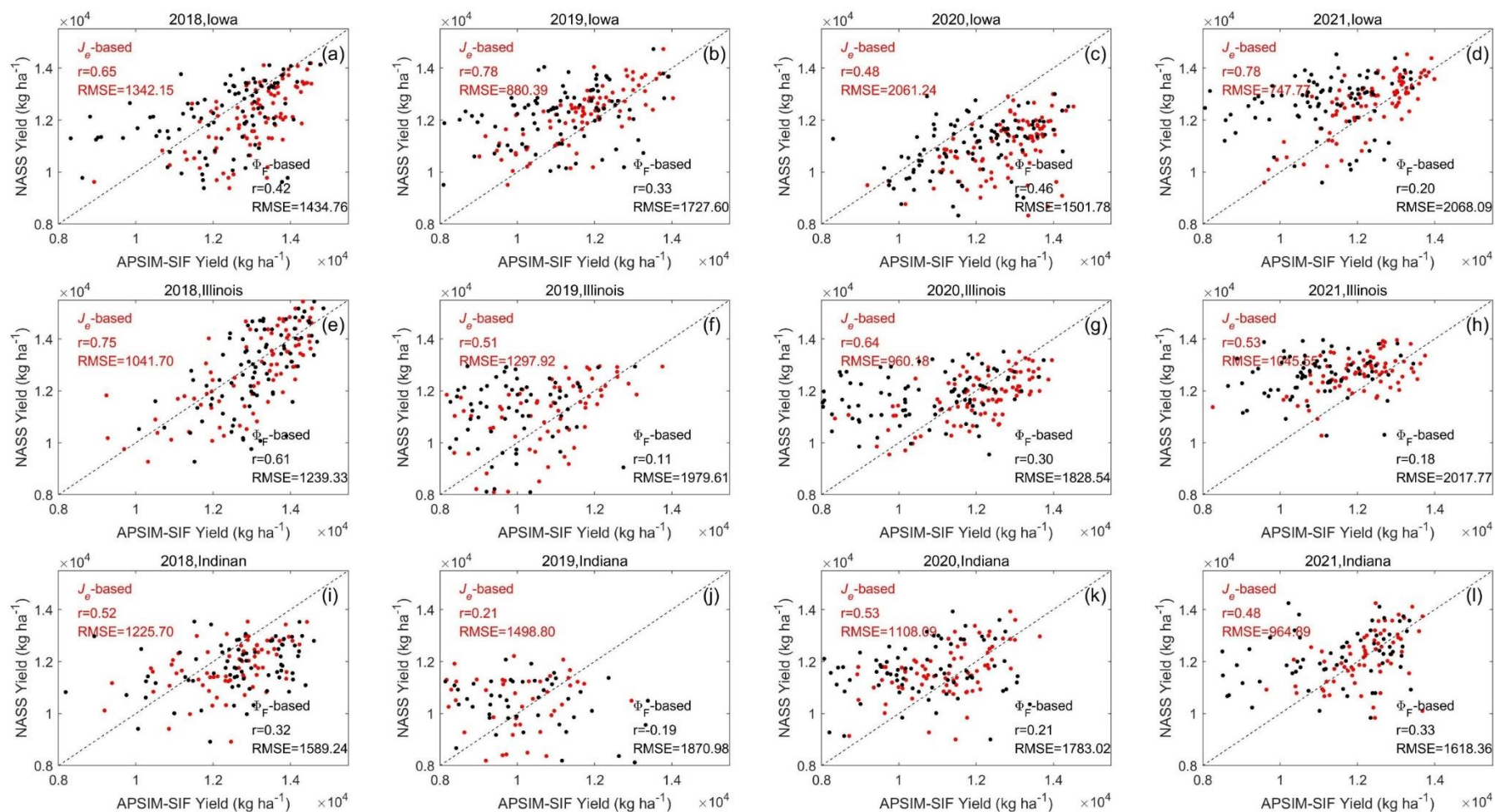


图 7-7 APSIM-SIF 基于 J_e 方法（红色）和基于 Φ_F 方法（黑色）模拟的玉米产量与 NASS 报告的不同年份和州的县域玉米产量比较。

Figure 7-7 Comparison of simulated maize yields from APSIM-SIF using the J_e -based method (red) and Φ_F -based method (black) with county-level maize yields reported by NASS for different years and states.

7.4 讨论

本研究使用基于 J_e 和 Φ_F 的两种方法将 APSIM 模型与 SIF 模块在光系统尺度进行结合, 并从参数敏感性、 SIF_{tot} -GPP 关系和干旱胁迫响应等方面评估了改进的 APSIM-SIF 模型。本研究目的在于确定合适的 SIF 建模方法以约束作物模型光合过程, 从而在干旱胁迫环境下提高作物产量模拟性能。

7.4.1 SIF 建模的不同参数化方案比较

本研究采用了两种 SIF 建模方法, 即基于 J_e 和 Φ_F 方法, 并将它们应用于 APSIM 模型中。尽管这两种方法在机理上是等效的, 但它们在参数化方案上存在明显差异。 Φ_F 和 J_e 方法的关键参数分别为 k_N 和 q_L 。 k_N 包括光合反应中可逆和持久组分, 并涉及叶黄素循环来将多余的能量散发为热量(Demmig-Adams et al., 2014)。而 q_L 量化 PSII 反应中心的分数, 并反映了细胞色素 b6f 复合物的氧化还原状态, 这对胁迫环境下光合作用响应过程至关重要(Johnson and Berry, 2021)。在过去的研究中, 大多数 SIF 耦合模型通过与 SCOPE 类似的方法来进行 k_N 建模(Van der Tol et al., 2014)。 k_N 的建模参数在干旱和非干旱条件下表现出明显的不同, 因此限制了其在胁迫和非胁迫条件下广泛的适用性。虽然 De Cannière 等(2021)提出了基于水分胁迫因子的加权平均 k_N 的方法, 但这种方法经验性强, 缺乏足够的理论基础。最近的研究表明在植物生理和光合作用研究中 q_L 相比 NPQ 对胁迫响应更迅速且更易进行建模。例如, Moustakas 等(2022)发现, 在检测干旱诱导的压力方面, q_L 比其他 PAM 参数(例如 Fv/Fm)更为敏感。Chang 等(2021)和 Han 等(2022)研究表明可以将 q_L 作为 PAR 的指数函数, 能够很大程度上反映 q_L 随光强的变化。总体而言, q_L 是叶绿素荧光和光合作用研究中有价值的参数, 需要进一步探究 q_L 对温度、土壤水分和其他环境压力的响应行为, 并进行更准确的建模。

本研究使用的两种荧光建模方法在模拟叶片水平 SIF 的主要驱动因素方面存在差异。全局敏感性分析表明, 基于 Φ_F 方法主要由冠层结构相关变量驱动。因此, 使用这种方法进行 SIF 模拟对 APAR 响应过于敏感, 该结论与 Parazoo 等(2020)研究相同。相反, 基于 J_e 方法主要依赖于实际的电子传递速率进行 SIF 模拟。通过碳反应中的羧化和 RuBP 再生平衡的实际电子传递速率限制直接估算 PSII 的 SIF, 提供了比冠层结构变化更多的植物生理信息, 因此基于 J_e 方法模拟的 SIF 对在干旱下对光合变化响应更为迅速以及作物产量模拟方面均有较好表现。

7.4.2 模拟和观测的 SIF_{tot} -GPP 关系的比较

相比 SIF_{toc} , SIF_{tot} 和 GPP 之间的线性关系更明显, 并且在不同植被类型中已被证明(Zhang et al., 2021)。在叶片水平上, 基于 J_e 和 Φ_F 方法的模拟 SIF_{tot} -GPP 关系的方法都是非线性的(Gu et al., 2019; Van der Tol et al., 2014)。然而, 在冠层水平上, SIF_{tot} -GPP

往往更加线性。在冠层中, SIF_{tot} 和 GPP 之间较好的线性关系原因有可能是来自具有不同光学特性和光合活性的多个叶片的信号的整合, 从而产生相对稳定的 SIF_{tot}/GPP 比率。然而, 在叶片水平上, 非线性原因可能是由于叶片受到诸如光强度和温度等因素的影响, 荧光对光化学过程与 NPQ 变化的非线性响应而产生。本研究表明, 尽管在干旱胁迫下 SIF_{tot} - GPP 关系仍然是线性的, 但线性程度比非胁迫条件下更弱, 并取决于冠层叶倾角的变化程度。Xu 等(2021)研究突出干旱胁迫下冠层叶倾角变化对 SIF 变异性的影响, 其结果表明随着土壤水分和叶片渗透压力的降低, 叶片发生卷曲, 冠层叶倾角增加, 荧光逃逸概率降低, 从而导致 $APAR$ 的减少和 SIF 的同步降低。本研究结果表明在使用基于 Φ_F 方法时, 如果没有发生冠层结构的变化, 在干旱期间模拟的 SIF_{tot} - GPP 线性关系会明显降低, 而考虑冠层叶片倾角的变化, SIF_{tot} - GPP 线性程度会提高。

7.4.3 模型应用

目前出现了许多将 SIF 纳入到生态系统模型的相关耦合过程研究, 以提高生态系统模型光合模拟的精度。这些耦合 SIF 的方式多是基于 Φ_F 的方法, 但是这种耦合方式模拟的 SIF 的大小对 $APAR$ 响应十分敏感(Parazoo et al., 2020)。有些研究表明基于 Φ_F 的方法的耦合模型对 V_{cmax} 的约束能力比较低, 例如 Verma 等(2017)和 Koffi 等(2015)使用 SCOPE 模型进行荧光约束光合能力的研究发现 V_{cmax} 对 SIF 响应并不敏感。为解决这个问题, 本研究提供了一种基于电子传递速率的方法, 以提高胁迫条件下 SIF 与光合而非 $APAR$ 的生理联系, 从而有助于更好的约束模型的光合生理参数。

近年来, 将 SIF 与陆地生物圈模型耦合用于估算光合能力相关参数已被广泛应用(Bacour et al., 2019; Norton et al., 2018)。然而, 模型的局限性和不确定性仍然存在。为了提高 SIF 模拟的准确性, 研究者们从荧光的辐射传输过程与参数构建方面提出了各种改进方法。一种方法是将冠层辐射传输过程纳入到生态系统模型中, 从而将 SIF 从叶片尺度扩展到冠层顶部(Li et al., 2022)。另一种方法是通过利用考虑 PAR 和温度对 NPQ 影响, 从而增强 NPQ 的参数化(Bacour et al., 2019)。本研究介绍了一种基于光系统水平上的电子转移速率的荧光建模新机制。该方法增强了在干旱胁迫条件下 SIF 对光合生理响应的敏感程度。总体而言, 本研究基于 J_e 的方法与基于 Φ_F 的方法均是机理性方程, 有着几乎相同的输入参数, 而且基于 J_e 的方法方程结构更为简化, 因此比较容易扩展到相关的生态系统模型中。

为了在考虑参数空间变异性的基础上获取光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的参数, APSIM-SIF 模型可以采取以下步骤: a) 参数量化: 将光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的生物物理学参数转化为 APSIM-SIF 模型中所需的参数, 以建立与模型的关联。b) 参数敏感性分析与优化: 基于光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的参数, 通过 APSIM-

SIF 模型进行参数敏感性分析和优化,进而根据实际情况对模型参数进行调整,以减小模型预测误差和不确定性。c) 参数空间映射:通过参数空间的映射,将光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的不同参数组合与模型响应相对应,同时将这些响应与实际遥感观测数据进行对比,以进一步调整模型参数,并提高模型的预测能力和适应性。d) 参数优选:最终,通过结合理论模型、实验研究和现场观测等多种数据源,并借助数据同化方法,APSIM-SIF 模型对光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的参数进行优选,以获得较高的模拟结果与实测数据吻合度和预测精度。综上所述,采取以上步骤可以在考虑参数空间变异性的前提下获得光系统尺度、叶片尺度和冠层尺度的参数,并从而提高 APSIM-SIF 模型的预测能力和应用性。

7.5 小结

本章研究是在第三章 APSIM-SIF 模型基础上,综合了第四章、第五章以及第六章的研究结果,对基于 Φ_F 方法的 APSIM-SIF 模型进行了改进。改进主要在两方面:首先是在模拟的尺度上,将叶片水平降尺度到 PSII 水平,从而与光合作用发生场所保持一致;然后改进荧光-光合耦合方程,以实际电子传递速率 (J_e) 为纽带连接光合与荧光,建立更为紧密的光合与荧光的耦合过程。通过对比基于 Φ_F 与基于 J_e 方法 APSIM-SIF 模拟结果表明:基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 在作物生长时期主要由光合生理过程参数 (χ_{SLN}) 控制,而基于 Φ_F 方法模拟的 SIF_{tot} 在对冠层结构参数 (ALA) 和 χ_{SLN} 参数响应都比较敏感;基于 J_e 方法在不同情景中模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系均较强 ($R^2 > 0.7$),而基于 Φ_F 方法在干旱胁迫下模拟的 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系会明显降低 ($R^2 < 0.62$),冠层叶倾角或者光合胁迫因子的改变有助于提高 SIF_{tot} 与 GPP 线性关系。基于 J_e 方法模拟的 SIF_{tot} 对干旱响应更为敏感,与 TROPOMI 观测值大小及变化趋势一致,而基于 Φ_F 方法在干旱胁迫下模拟的 SIF_{tot} 显然会有所高估。在作物产量模拟方面,基于 J_e 方法 APSIM-SIF 模拟作物产量与县域统计产量的相关性较高,最高达到 0.78,而基于 Φ_F 方法模拟的作物产量与县域统计产量相比明显低估,最高相关系数仅为 0.61。本研究提供了一个基于光系统水平进行荧光-光合建模的框架,通过耦合遥感 SIF,有助于改善作物模型在胁迫环境下作物产量模拟的精度。

第八章 结论与展望

8.1 主要结论

本研究以干旱胁迫下光合与叶绿素荧光生理与辐射传输过程为核心进行了 APSIM-SIF 模型的构建与改进。首先,基于已有叶绿素荧光与光合相关理论,在 APSIM-DCaPST 模型中耦合荧光模块用于模拟作物冠层顶日光诱导叶绿素荧光,成功构建 APSIM-SIF 模型。然后,针对模型存在的干旱胁迫环境下模型参数不适用以及荧光逃逸概率与农田冠层结构复杂关系等实际应用问题,本研究采用干旱生理实验分析和辐射传输模型模拟方法进行解决,并根据研究结果对 APSIM-SIF 模型进行了改进。最后,在区域上对 APSIM-SIF 模型进行应用,用以说明改进方法的有效性。本研究主要结论如下:

(1) 光系统荧光激发谱反演、重构以及 PSII 和 PSI 荧光激发效率分离

通过 FLUSEPCT 模型反演可以得到稳态荧光下的光系统荧光激发谱,在光强变化下,光系统荧光激发谱主要受到 NPQ (波峰) 和净光合速率 (波谷) 的影响,PSII 荧光激发效率对光强响应敏感,尤其是在低光强下达到最高值,之后随着光强的增加而下降,PSI 荧光激发效率在短时间光强变化下较为稳定,在高光强下 PSII 和 PSI 荧光激发效率都会达到稳定,此时两者比例为 2:1。基于重构的光系统荧光激发谱可以提高 FLUSPECT 模型在光、温、CO₂ 环境下对叶片上下行荧光谱形的模拟。

(2) 干旱胁迫下叶绿素荧光 (ChlF) 与光合解耦原因与提高方法

干旱胁迫下 ChlF 与光合解耦的主要原因是两者的主要控制因素不同,ChlF 主要受控于 PAR,而光合主要受控于气孔导度,因此干旱胁迫下气孔导度的敏感性决定了 ChlF 与光合耦合程度。本研究所用的玉米叶片对土壤水分响应敏感,土壤水分的下降导致光合迅速降低,其水力调节策略符合等水调节行为。而叶片 ChlF 并没有发生明显变化导致 APAR 仍然很高因此 ChlF 没有明显下降,由此导致 ChlF 与光合线性关系明显下降 ($R^2 < 0.2$)。通过引入 q_L 参数可以明显提高胁迫条件下有约束的叶绿素荧光 ($\text{ChlF} \times q_L$) 对光合的估算能力 ($R^2 > 0.9$),这说明 PSII 的光反应中心开放程度包含了暗反应过程光合胁迫信息。

(3) 荧光观测方向、农田株行距以及土壤反射率对冠层 SIF 逃逸概率的影响

基于一维和三维的辐射传输模型模拟说明半球性荧光逃逸概率主要与 LAI 和叶倾角分布函数有关,可以通过反射系数和消化系数进行全波段半球性荧光逃逸概率 ($R^2 > 0.95$),而方向性荧光逃逸概率受到叶倾角分布函数、观测角度以及 LAI 的影响较大,可以用方向性近红外反射率、NDVI 以及冠层吸收的 PAR 比例进行估算 ($R^2 = 0.89$)。

农田场景辐射传输模拟结果说明高种植密度下，土壤反射率对荧光逃逸概率影响较低，而低种植密度下，土壤反射率有显著影响；种植行距相比种植株距对荧光逃逸概率影响更大。农田“垄行”种植结构对冠层荧光逃逸概率的影响不可忽略。

(4) 基于物理过程将叶片发射的全波段 SIF 转换为冠层顶 (TOC) 单波段 SIF

全波段 SIF 转换为单波段 TOC SIF 的过程与叶片生理参数和冠层结构相关，因此本研究将此分解为两个过程，即 ϵ 和 f_{esc} 。 ϵ 与叶片生理状态相关主要受到叶绿素浓度和 PSII 荧光量子产量的影响，而 f_{esc} 反映了冠层结构对叶片发射的 SIF 辐射传输过程的影响。通过 APSIM-SIF 在美国中西部模拟说明作物生长季节的高峰期 f_{esc} 相对稳定，这有助于提高模型在区域的模拟效率。站点模拟结果显示，APSIM-SIF 可以准确地跟踪作物生长季 GPP 和 SIF 的动态变化，因此通过 ϵ 和 f_{esc} 有助于提高作物模型的 SIF 模拟效率。

(5) APSIM-SIF 模型改进与应用

首先是在模拟的尺度上对 APSIM-SIF 进行改进，将叶片水平降尺度到光系统 II 水平，从而与叶绿体光合作用尺度保持一致。然后通过引入 q_L 参数基于 MLR 方法改进荧光-光合耦合方法，以实际电子传递速率为纽带从而建立更为紧密的光合与荧光机理关系。最后在站点和区域上进行了验证验证，结果表明改进的 APSIM-SIF 模型极大提高了模拟的作物冠层总 SIF 的模拟精度以及对干旱胁迫的响应能力。通过结合遥感 SIF 数据对模型光合参数进行优化，结果表明基于 MLR 方法有效约束了 APSIM-SIF 区域作物产量模拟能力。

8.2 论文创新点

(1) 本研究使用叶绿素荧光-光合-热耗散同步测量先进设备以及叶片荧光模型方法进行光系统荧光研究，研究发现光系统荧光激发谱构建可以提高光系统水平荧光机理建模的准确性。

(2) 本研究解析了干旱胁迫下叶绿素荧光与光合解耦的原因，并提出基于 $ChlF \times q_L$ 方法可以有效提高干旱胁迫条件下叶绿素荧光对光合的估算能力。

(3) 首次在作物模型 (APSIM) 中完成光系统水平光合-荧光耦合过程以及进行光系统到叶片再到冠层的机理建模框架，采用模块化建模方法，便于 SIF 模块的扩展与迁移。

(4) 本研究构建的 APSIM-SIF 模型为遥感日光诱导叶绿素荧光与作物模型模拟搭建了桥梁，在智慧农业领域具有较大的应用潜力。

8.3 不足与展望

本研究从光系统、叶片、冠层、区域四个方面进行叶绿素荧光与作物模型的耦合系统性研究，采用生理实验和辐射传输模型模拟研究干旱胁迫下荧光与光合的生理机制以及荧光辐射传输过程影响因素分析，用于构建并改进 APSIM-SIF 模型。尽管取得了一些研究成果，但仍然存在问题，需要在今后的研究中进行改进。

(1) 本研究通过 FLUSEPCT 模型反演获取荧光激发谱和基于 SVD 方法重构荧光激发谱，仅在叶片尺度上进行了重构荧光激发谱在多种环境条件下的验证。在今后还需要在冠层辐射传输模型中的进行冠层顶荧光光谱模拟验证，尤其是缺乏光合机理过程模拟的三维荧光辐射传输模型如 DART、FluorFLiES 等。

(2) 本研究 q_L 建模方法目前只针对作物类型的 q_L 与 PAR 的经验关系。其他多种植被类型的 q_L 与其他环境因子如温度、CO₂、土壤含水量的关系还需要更为具体的生理实验进行明确，并进行多环境因子的 q_L 机理建模，从而进一步提高多种胁迫条件下 $\text{ChlF} \times q_L$ 估算光合的能力。

(3) 本研究通过干旱生理实验明确水力调节策略为等水行为的玉米作物在干旱胁迫下荧光与光合线性关系解耦。由于未进行 C₃ 作物的相关生理胁迫实验研究，APSIM-SIF 模型改进主要针对 C₄ 玉米作物，今后还需要进行 C₃ 作物如小麦、大豆等干旱胁迫实验，以明确不同碳代谢类型作物气孔敏感程度对荧光与光合关系生理机制的影响。

(4) 本研究使用 APSIM-SIF 模型在区域上模拟所用的 TROPOMI SIF 数据，尽管其时空分辨率优于目前已有的其他 SIF 卫星数据，但约 7km 的空间分辨率导致 APSIM-SIF 模型仍然无法对农场尺度作物产量进行模拟。随着近地面无人机荧光传感器以及荧光探测卫星（如 FLEX）的发展，APSIM-SIF 模型有望在农场尺度上进行作物光合生产力模拟与监测。

(5) 改进的 APSIM-SIF 模型在遥感 SIF 的约束下，尽管对区域作物产量模拟与县域统计产量比较有较高的相关性，但是在不同年份和站点仍不能取得一致性较好的模拟效果。这主要是由于未进行区域管理参数与品种参数校准，因此在未来研究中还需要明确相关关键参数，进一步提高 APSIM-SIF 模型区域作物产量模拟能力。

参考文献

- 陈思媛, 竞霞, 董莹莹 和 刘良云, 2019. 基于日光诱导叶绿素荧光与反射率光谱的小麦条锈病探测研究. 遥感技术与应用, 34(03): 511-520.
- 程占慧 和 刘良云, 2010. 基于叶绿素荧光发射光谱的光能利用率探测. 农业工程学报(S2): 74-80.
- 付立哲, 屈永华 和 王锦地, 2017. MODIS LAI 产品真实性检验与偏差分析. 遥感学报, 21(02): 206-217.
- 关雅楠, 黄正来, 张文静, 石小东 和 张裴裴, 2013. 低温胁迫对不同基因型小麦品种光合性能的影响. 应用生态学报, 24(07): 1895-1899.
- 胡姣婵, 刘良云 和 刘新杰, 2015. FluorMOD 模拟叶绿素荧光夫琅和费暗线反演算法不确定性分析. 遥感学报, 19(4): 594-608.
- 刘良云, 关琳琳, 彭代亮, 胡勇 和 刘玲玲, 2012. C3, C4 作物的光保护机制差异的光谱探测研究. 遥感学报, 16(4): 783-795.
- 刘青瑞, 居为民, 张永光, 张雷明, 王绍强, 周艳莲, 赵风华, 闫俊华, 韩士杰, 郝彦宾, 陈世莘, 李英年和 项文化, 2017. 日光诱导叶绿素荧光估算中国典型生态系统总初级生产力的能力. 遥感技术与应用, 32(02): 363-373.
- 史晓亮, 吴梦月 和 丁皓, 2020. SPEI 和植被遥感信息监测西南地区干旱差异分析. 农业机械学报, 51(12): 184-192.
- 王春乙, 娄秀荣 和 王建林, 2007. 中国农业气象灾害对作物产量的影响. 自然灾害学报, 16(5): 37-43.
- 魏国强, 朱祝军, 方学智, 李娟 和 程俊, 2004. NaCl 胁迫对不同品种黄瓜幼苗生长、叶绿素荧光特性和活性氧代谢的影响. 中国农业科学(11): 1754-1759.
- 奚雷, 单楠, 杨沈斌 和 张永光, 2019. 基于 SCOPE 模型的水稻不同生育期日光诱导叶绿素荧光及 GPP 模拟研究. 遥感技术与应用, 34(3): 488-499.
- 杨飞, 孙九林, 张柏, 姚作芳, 王宗明, 王卷乐 和 乐夏芳, 2010. 基于 PROSAIL 模型及 TM 与实测数据的 MODIS LAI 精度评价. 农业工程学报, 26(04): 192-197+385.
- 杨晓青, 张岁岐, 梁宗锁 和 山颖, 2004. 水分胁迫对不同抗旱类型冬小麦幼苗叶绿素荧光参数的影响. 西北植物学报(05): 812-816.
- 张守仁, 1999. 叶绿素荧光动力学参数的意义及讨论. 植物学通报(04): 444-448.
- 章钊颖, 王松寒, 邱博, 宋练 和 张永光, 2019. 日光诱导叶绿素荧光遥感反演及碳循环应用进展.
- 赵叶, 竞霞, 黄文江, 董莹莹 和 李存军, 2019. 日光诱导叶绿素荧光与反射率光谱数据监测小麦条锈病严重度的对比分析. 光谱学与光谱分析, 39(9): 2739.
- Ač, A., Malenovský, Z., Olejníčková, J., Gallé, A., Rascher, U. and Mohammed, G., 2015. Meta-analysis assessing potential of steady-state chlorophyll fluorescence for remote sensing detection of plant water, temperature and nitrogen stress. Remote sensing of environment, 168: 420-436.
- Agati, G., 1998. Response of the in vivo chlorophyll fluorescence spectrum to environmental factors and laser excitation wavelength. Pure and Applied Optics: Journal of the European Optical Society Part A, 7(4): 797.
- Anderson, M.C., Hain, C., Wardlow, B., Pimstein, A., Mecikalski, J.R. and Kustas, W.P., 2011. Evaluation of drought indices based on thermal remote sensing of evapotranspiration over the continental United States. Journal of Climate, 24(8): 2025-2044.
- Bacour, C., Maignan, F., MacBean, N., Porcar - Castell, A., Flexas, J., Frankenberg, C., Peylin, P., Chevallier, F., Vuichard, N. and Bastrikov, V., 2019. Improving estimates of gross primary productivity by assimilating solar - induced fluorescence satellite retrievals in a terrestrial biosphere model using a process - based SIF

- model. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 124(11): 3281-3306.
- Bacour, C., Maignan, F., Porcar-Castell, A., MacBean, N., Goulas, Y., Flexas, J., Guanter, L., Joiner, J. and Peylin, P., 2016. Potentials of satellite derived SIF products to constrain GPP simulated by the new ORCHIDEE-FluOR terrestrial model at the global scale, AGU Fall Meeting Abstracts, pp. B54A-03.
- Baker, A., Tipping, E., Thacker, S. and Gondar, D., 2008. Relating dissolved organic matter fluorescence and functional properties. *Chemosphere*, 73(11): 1765-1772.
- Baker, J. and Griffis, T., 2005. Examining strategies to improve the carbon balance of corn/soybean agriculture using eddy covariance and mass balance techniques. *Agricultural and Forest Meteorology*, 128(3-4): 163-177.
- Bernacchi, C.J., Hollinger, S.E. and Meyers, T., 2005. The conversion of the corn/soybean ecosystem to no - till agriculture may result in a carbon sink. *Global Change Biology*, 11(11): 1867-1872.
- Buschmann, C., 2007. Variability and application of the chlorophyll fluorescence emission ratio red/far-red of leaves. *Photosynthesis Research*, 92: 261-271.
- Chang, C.Y., Wen, J., Han, J., Kira, O., LeVonne, J., Melkonian, J., Riha, S.J., Skovira, J., Ng, S. and Gu, L., 2021. Unpacking the drivers of diurnal dynamics of sun-induced chlorophyll fluorescence (SIF): Canopy structure, plant physiology, instrument configuration and retrieval methods. *Remote Sensing of Environment*, 265: 112672.
- Chen, J., Liu, J., Cihlar, J. and Goulden, M., 1999. Daily canopy photosynthesis model through temporal and spatial scaling for remote sensing applications. *Ecological modelling*, 124(2-3): 99-119.
- Chen, S., Huang, Y. and Wang, G., 2021. Detecting drought-induced GPP spatiotemporal variabilities with sun-induced chlorophyll fluorescence during the 2009/2010 droughts in China. *Ecological Indicators*, 121: 107092.
- Chen, X., Mo, X., Zhang, Y., Sun, Z., Liu, Y., Hu, S. and Liu, S., 2019. Drought detection and assessment with solar-induced chlorophyll fluorescence in summer maize growth period over North China Plain. *Ecological Indicators*, 104: 347-356.
- Cook, E.R., Seager, R., Cane, M.A. and Stahle, D.W., 2007. North American drought: Reconstructions, causes, and consequences. *Earth-Science Reviews*, 81(1-2): 93-134.
- Croce, R., Zucchelli, G., Garlaschi, F.M., Bassi, R. and Jennings, R.C., 1996. Excited state equilibration in the photosystem I- light-harvesting I complex: P700 is almost isoenergetic with its antenna. *Biochemistry*, 35(26): 8572-8579.
- Cui, T., Sun, R., Xiao, Z., Liang, Z. and Wang, J., 2020. Simulating spatially distributed solar-induced chlorophyll fluorescence using a BEPS-SCOPE coupling framework. *Agricultural and Forest Meteorology*, 295: 108169.
- Dau, H., 1994. Molecular mechanisms and quantitative models of variable photosystem II fluorescence. *Photochemistry and photobiology*, 60(1): 1-23.
- De Cannière, S., Herbst, M., Vereecken, H., Defourny, P. and Jonard, F., 2021. Constraining water limitation of photosynthesis in a crop growth model with sun-induced chlorophyll fluorescence. *Remote Sensing of Environment*, 267: 112722.
- De Pury, D. and Farquhar, G., 1997. Simple scaling of photosynthesis from leaves to canopies without the errors of big - leaf models. *Plant, Cell & Environment*, 20(5): 537-557.
- Dechant, B., Ryu, Y., Badgley, G., Zeng, Y., Berry, J.A., Zhang, Y., Goulas, Y., Li, Z., Zhang, Q. and Kang, M., 2020. Canopy structure explains the relationship between photosynthesis and sun-induced chlorophyll fluorescence in crops. *Remote Sensing of Environment*, 241: 111733.
- Demmig-Adams, B., Garab, G., Adams III, W. and Govindjee, U., 2014. *Non-photochemical quenching and energy dissipation in plants, algae and cyanobacteria*, 40. Springer.

- Disney, M., Lewis, P. and Saich, P., 2006. 3D modelling of forest canopy structure for remote sensing simulations in the optical and microwave domains. *Remote Sensing of Environment*, 100(1): 114-132.
- Dold, C., Büyükcangaz, H., Rondinelli, W., Prueger, J., Sauer, T. and Hatfield, J., 2017. Long-term carbon uptake of agro-ecosystems in the Midwest. *Agricultural and Forest Meteorology*, 232: 128-140.
- Farquhar, G.D., von Caemmerer, S.v. and Berry, J.A., 1980. A biochemical model of photosynthetic CO₂ assimilation in leaves of C₃ species. *planta*, 149: 78-90.
- Feng, P., Wang, B., Li Liu, D., Waters, C. and Yu, Q., 2019. Incorporating machine learning with biophysical model can improve the evaluation of climate extremes impacts on wheat yield in south-eastern Australia. *Agricultural and Forest Meteorology*, 275: 100-113.
- Feret, J.-B., François, C., Asner, G.P., Gitelson, A.A., Martin, R.E., Bidel, L.P., Ustin, S.L., Le Maire, G. and Jacquemoud, S., 2008. PROSPECT-4 and 5: Advances in the leaf optical properties model separating photosynthetic pigments. *Remote sensing of environment*, 112(6): 3030-3043.
- Franck, F., Juneau, P. and Popovic, R., 2002. Resolution of the photosystem I and photosystem II contributions to chlorophyll fluorescence of intact leaves at room temperature. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics*, 1556(2-3): 239-246.
- Frankenberg, C., Fisher, J.B., Worden, J., Badgley, G., Saatchi, S.S., Lee, J.E., Toon, G.C., Butz, A., Jung, M. and Kuze, A., 2011. New global observations of the terrestrial carbon cycle from GOSAT: Patterns of plant fluorescence with gross primary productivity. *Geophysical Research Letters*, 38(17).
- Gastellu-Etchegorry, J.-P., Demarez, V., Pinel, V. and Zagolski, F., 1996. Modeling radiative transfer in heterogeneous 3-D vegetation canopies. *Remote sensing of environment*, 58(2): 131-156.
- Gastellu-Etchegorry, J.-P., Lauret, N., Yin, T., Landier, L., Kallel, A., Malenovský, Z., Al Bitar, A., Aval, J., Benhmida, S. and Qi, J., 2017. DART: recent advances in remote sensing data modeling with atmosphere, polarization, and chlorophyll fluorescence. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 10(6): 2640-2649.
- Gastellu-Etchegorry, J.-P., Malenovský, Z., Gomez, N.D., Meynier, J., Lauret, N., Yin, T., Qi, J., Guilleux, J., Chavanon, E. and Cook, B., 2018. Simulation of chlorophyll fluorescence for sun-and shade-adapted leaves of 3d canopies with the dart model, IGARSS 2018-2018 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium. IEEE, pp. 5995-5998.
- Gitelson, A.A., Peng, Y. and Huemmrich, K.F., 2014. Relationship between fraction of radiation absorbed by photosynthesizing maize and soybean canopies and NDVI from remotely sensed data taken at close range and from MODIS 250 m resolution data. *Remote Sensing of Environment*, 147: 108-120.
- Griffis, T., Sargent, S., Baker, J., Lee, X., Tanner, B., Greene, J., Swiatek, E. and Billmark, K., 2008. Direct measurement of biosphere - atmosphere isotopic CO₂ exchange using the eddy covariance technique. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D8).
- Grossmann, K., Frankenberg, C., Magney, T.S., Hurlock, S.C., Seibt, U. and Stutz, J., 2018. PhotoSpec: A new instrument to measure spatially distributed red and far-red Solar-Induced Chlorophyll Fluorescence. *Remote Sensing of Environment*, 216: 311-327.
- Gu, L., Han, J., Wood, J.D., Chang, C.Y.Y. and Sun, Y., 2019. Sun - induced Chl fluorescence and its importance for biophysical modeling of photosynthesis based on light reactions. *New Phytologist*, 223(3): 1179-1191.
- Guan, K., Berry, J.A., Zhang, Y., Joiner, J., Guanter, L., Badgley, G. and Lobell, D.B., 2016. Improving the monitoring of crop productivity using spaceborne solar - induced fluorescence. *Global change biology*, 22(2): 716-726.
- Guanter, L., Bacour, C., Schneider, A., Aben, I., van Kempen, T.A., Maignan, F., Retscher, C., Köhler, P., Frankenberg, C. and Joiner, J., 2021. The TROPISIF global sun-induced fluorescence dataset from the

- Sentinel-5P TROPOMI mission. *Earth System Science Data*, 13(11): 5423-5440.
- Guanter, L., Zhang, Y., Jung, M., Joiner, J., Voigt, M., Berry, J.A., Frankenberg, C., Huete, A.R., Zarco-Tejada, P. and Lee, J.-E., 2014. Global and time-resolved monitoring of crop photosynthesis with chlorophyll fluorescence. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111(14): E1327-E1333.
- Guisse, B., Srivastava, A. and Strasser, R., 1995. The polyphasic rise of the chlorophyll a fluorescence (OKJIP) in heat-stressed leaves. *Archives des sciences*, 48(2): 147-160.
- Han, J., Chang, C., Gu, L., Zhang, Y., Walker, A., Wen, J., Kira, O., McNaull, S. and Sun, Y., 2021. How to Estimate Photosynthesis from Solar-induced Chlorophyll Fluorescence (SIF)? Building the Physiological Foundation Utilizing Extensive Leaf-level Measurements across Diverse Plant Biomes and Environments, AGU Fall Meeting Abstracts, pp. B22C-02.
- Han, J., Chang, C.Y.Y., Gu, L., Zhang, Y., Meeker, E.W., Magney, T.S., Walker, A.P., Wen, J., Kira, O. and McNaull, S., 2022. The physiological basis for estimating photosynthesis from Chl a fluorescence. *New Phytologist*, 234(4): 1206-1219.
- Hao, D., Asrar, G.R., Zeng, Y., Yang, X., Li, X., Xiao, J., Guan, K., Wen, J., Xiao, Q. and Berry, J.A., 2021a. Potential of hotspot solar - induced chlorophyll fluorescence for better tracking terrestrial photosynthesis. *Global change biology*, 27(10): 2144-2158.
- Hao, D., Zeng, Y., Qiu, H., Biriukova, K., Celesti, M., Migliavacca, M., Rossini, M., Asrar, G.R. and Chen, M., 2021b. Practical approaches for normalizing directional solar-induced fluorescence to a standard viewing geometry. *Remote Sensing of Environment*, 255: 112171.
- Hao, D., Zeng, Y., Zhang, Z., Zhang, Y., Qiu, H., Biriukova, K., Celesti, M., Rossini, M., Zhu, P. and Asrar, G.R., 2022. Adjusting solar-induced fluorescence to nadir-viewing provides a better proxy for GPP. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 186: 157-169.
- Hartley, A., MacBean, N., Georgievski, G. and Bontemps, S., 2017. Uncertainty in plant functional type distributions and its impact on land surface models. *Remote Sensing of Environment*, 203: 71-89.
- He, L., Magney, T., Dutta, D., Yin, Y., Köhler, P., Grossmann, K., Stutz, J., Dold, C., Hatfield, J. and Guan, K., 2020. From the ground to space: Using solar - induced chlorophyll fluorescence to estimate crop productivity. *Geophysical Research Letters*, 47(7): e2020GL087474.
- Helm, L.T., Shi, H., Lerdau, M.T. and Yang, X., 2020. Solar - induced chlorophyll fluorescence and short - term photosynthetic response to drought. *Ecological Applications*, 30(5): e02101.
- Hernández-Clemente, R., North, P.R., Hornero, A. and Zarco-Tejada, P.J., 2017. Assessing the effects of forest health on sun-induced chlorophyll fluorescence using the FluorFLIGHT 3-D radiative transfer model to account for forest structure. *Remote Sensing of Environment*, 193: 165-179.
- Hernandez-Ramirez, G., Hatfield, J.L., Parkin, T.B., Sauer, T.J. and Prueger, J.H., 2011. Carbon dioxide fluxes in corn-soybean rotation in the midwestern US: Inter-and intra-annual variations, and biophysical controls. *Agricultural and Forest Meteorology*, 151(12): 1831-1842.
- Hoerling, M., Eischeid, J., Kumar, A., Leung, R., Mariotti, A., Mo, K., Schubert, S. and Seager, R., 2014. Causes and predictability of the 2012 Great Plains drought. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 95(2): 269-282.
- Holzworth, D.P., Huth, N.I., deVoil, P.G., Zurcher, E.J., Herrmann, N.I., McLean, G., Chenu, K., van Oosterom, E.J., Snow, V. and Murphy, C., 2014. APSIM—evolution towards a new generation of agricultural systems simulation. *Environmental Modelling & Software*, 62: 327-350.
- Huang, J., Gómez-Dans, J.L., Huang, H., Ma, H., Wu, Q., Lewis, P.E., Liang, S., Chen, Z., Xue, J.-H. and Wu, Y., 2019. Assimilation of remote sensing into crop growth models: Current status and perspectives. *Agricultural and forest meteorology*, 276: 107609.

- Huang, J., Sedano, F., Huang, Y., Ma, H., Li, X., Liang, S., Tian, L., Zhang, X., Fan, J. and Wu, W., 2016. Assimilating a synthetic Kalman filter leaf area index series into the WOFOST model to improve regional winter wheat yield estimation. *Agricultural and Forest Meteorology*, 216: 188-202.
- Jacquemoud, S. and Baret, F., 1990. PROSPECT: A model of leaf optical properties spectra. *Remote sensing of environment*, 34(2): 75-91.
- Johnson, J. and Berry, J., 2021. The role of cytochrome b6f in the control of steady-state photosynthesis: a conceptual and quantitative model. *Photosynthesis Research*, 148(3): 101-136.
- Jones, E. and van Vliet, M.T., 2018. Drought impacts on river salinity in the southern US: Implications for water scarcity. *Science of the total environment*, 644: 844-853.
- Kallel, A., 2020. FluLCVRT: Reflectance and fluorescence of leaf and canopy modeling based on Monte Carlo vector radiative transfer simulation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 253: 107183.
- Kimm, H., Guan, K., Burroughs, C.H., Peng, B., Ainsworth, E.A., Bernacchi, C.J., Moore, C.E., Kumagai, E., Yang, X. and Berry, J.A., 2021. Quantifying high - temperature stress on soybean canopy photosynthesis: The unique role of sun - induced chlorophyll fluorescence. *Global change biology*, 27(11): 2403-2415.
- Knorr, W., 2000. Annual and interannual CO₂ exchanges of the terrestrial biosphere: Process - based simulations and uncertainties. *Global ecology and biogeography*, 9(3): 225-252.
- Knyazikhin, Y., Schull, M.A., Xu, L., Myneni, R.B. and Samanta, A., 2011. Canopy spectral invariants. Part 1: A new concept in remote sensing of vegetation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(4): 727-735.
- Koffi, E., Rayner, P., Norton, A., Frankenberg, C. and Scholze, M., 2015. Investigating the usefulness of satellite-derived fluorescence data in inferring gross primary productivity within the carbon cycle data assimilation system. *Biogeosciences*, 12(13): 4067-4084.
- Köhler, P., Frankenberg, C., Magney, T.S., Guanter, L., Joiner, J. and Landgraf, J., 2018. Global retrievals of solar - induced chlorophyll fluorescence with TROPOMI: First results and intersensor comparison to OCO - 2. *Geophysical Research Letters*, 45(19): 10,456-10,463.
- Kozyrev, N., 1956. Luminescence of the lunar surface and intensity of corpuscular radiation of the Sun. *Proceedings of the Crimean Astron. Observatory*, 16: 148-158.
- Krause, a.G. and Weis, E., 1991. Chlorophyll fluorescence and photosynthesis: the basics. *Annual review of plant biology*, 42(1): 313-349.
- Kukal, M. and Irmak, S., 2020. Light interactions, use and efficiency in row crop canopies under optimal growth conditions. *Agricultural and Forest Meteorology*, 284: 107887.
- Lawrence, D.M., Oleson, K.W., Flanner, M.G., Thornton, P.E., Swenson, S.C., Lawrence, P.J., Zeng, X., Yang, Z.L., Levis, S. and Sakaguchi, K., 2011. Parameterization improvements and functional and structural advances in version 4 of the Community Land Model. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 3(1).
- Lee, J.-E., Frankenberg, C., van der Tol, C., Berry, J.A., Guanter, L., Boyce, C.K., Fisher, J.B., Morrow, E., Worden, J.R. and Asefi, S., 2013. Forest productivity and water stress in Amazonia: Observations from GOSAT chlorophyll fluorescence. *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 280(1761): 20130171.
- Lee, J.E., Berry, J.A., van der Tol, C., Yang, X., Guanter, L., Damm, A., Baker, I. and Frankenberg, C., 2015. Simulations of chlorophyll fluorescence incorporated into the C ommunity L and M odel version 4. *Global change biology*, 21(9): 3469-3477.
- Li, R., Lombardozi, D., Shi, M., Frankenberg, C., Parazoo, N.C., Köhler, P., Yi, K., Guan, K. and Yang, X., 2022. Representation of Leaf - to - Canopy Radiative Transfer Processes Improves Simulation of Far - Red

- Solar - Induced Chlorophyll Fluorescence in the Community Land Model Version 5. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 14(3): e2021MS002747.
- Li, X., Xiao, J., He, B., Altaf Arain, M., Beringer, J., Desai, A.R., Emmel, C., Hollinger, D.Y., Krasnova, A. and Mammarella, I., 2018. Solar - induced chlorophyll fluorescence is strongly correlated with terrestrial photosynthesis for a wide variety of biomes: First global analysis based on OCO - 2 and flux tower observations. *Global change biology*, 24(9): 3990-4008.
- Liu, L., Liu, X. and Guan, L., 2016. Uncertainties in linking solar-induced chlorophyll fluorescence to plant photosynthetic activities, 2016 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS). IEEE, pp. 4414-4417.
- Liu, W., Atherton, J., Möttus, M., Gastellu-Etcheberry, J.-P., Malenovsky, Z., Raunonen, P., Åkerblom, M., Mäkipää, R. and Porcar-Castell, A., 2019a. Simulating solar-induced chlorophyll fluorescence in a boreal forest stand reconstructed from terrestrial laser scanning measurements. *Remote Sensing of Environment*, 232: 111274.
- Liu, W., Luo, S., Lu, X., Atherton, J. and Gastellu-Etcheberry, J.-P., 2020. Simulation-based evaluation of the estimation methods of far-red solar-induced chlorophyll fluorescence escape probability in discontinuous Forest canopies. *Remote Sensing*, 12(23): 3962.
- Liu, X., Liu, Z., Liu, L., Lu, X., Chen, J., Du, S. and Zou, C., 2021. Modelling the influence of incident radiation on the SIF-based GPP estimation for maize. *Agricultural and Forest Meteorology*, 307: 108522.
- Liu, Y., Chen, J.M., He, L., Zhang, Z., Wang, R., Rogers, C., Fan, W., de Oliveira, G. and Xie, X., 2022a. Non-linearity between gross primary productivity and far-red solar-induced chlorophyll fluorescence emitted from canopies of major biomes. *Remote Sensing of Environment*, 271: 112896.
- Liu, Z., Lu, X., An, S., Heskell, M., Yang, H. and Tang, J., 2019b. Advantage of multi-band solar-induced chlorophyll fluorescence to derive canopy photosynthesis in a temperate forest. *Agricultural and Forest Meteorology*, 279: 107691.
- Liu, Z., Zhao, F., Liu, X., Yu, Q., Wang, Y., Peng, X., Cai, H. and Lu, X., 2022b. Direct estimation of photosynthetic CO₂ assimilation from solar-induced chlorophyll fluorescence (SIF). *Remote Sensing of Environment*, 271: 112893.
- Lu, X., Liu, Z., Zhao, F. and Tang, J., 2020. Comparison of total emitted solar-induced chlorophyll fluorescence (SIF) and top-of-canopy (TOC) SIF in estimating photosynthesis. *Remote Sensing of Environment*, 251: 112083.
- Lu, X., Liu, Z., Zhou, Y., Liu, Y., An, S. and Tang, J., 2018. Comparison of phenology estimated from reflectance-based indices and solar-induced chlorophyll fluorescence (SIF) observations in a temperate forest using GPP-based phenology as the standard. *Remote Sensing*, 10(6): 932.
- Magney, T.S., Barnes, M.L. and Yang, X., 2020. On the covariation of chlorophyll fluorescence and photosynthesis across scales. *Geophysical Research Letters*, 47(23): e2020GL091098.
- Magney, T.S., Frankenberg, C., Fisher, J.B., Sun, Y., North, G.B., Davis, T.S., Kornfeld, A. and Siebke, K., 2017. Connecting active to passive fluorescence with photosynthesis: a method for evaluating remote sensing measurements of Chl fluorescence. *New phytologist*, 215(4): 1594-1608.
- Magney, T.S., Frankenberg, C., Köhler, P., North, G., Davis, T.S., Dold, C., Dutta, D., Fisher, J.B., Grossmann, K. and Harrington, A., 2019. Disentangling changes in the spectral shape of chlorophyll fluorescence: Implications for remote sensing of photosynthesis. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 124(6): 1491-1507.
- Marrs, J., Reblin, J., Logan, B., Allen, D., Reinmann, A., Bombard, D., Tabachnik, D. and Hutya, L., 2020. Solar - induced fluorescence does not track photosynthetic carbon assimilation following induced stomatal

- closure. *Geophysical Research Letters*, 47(15): e2020GL087956.
- Martini, D., Sakowska, K., Wohlfahrt, G., Pacheco - Labrador, J., van der Tol, C., Porcar - Castell, A., Magney, T.S., Carrara, A., Colombo, R. and El - Madany, T.S., 2022. Heatwave breaks down the linearity between sun - induced fluorescence and gross primary production. *New phytologist*, 233(6): 2415-2428.
- Mohammed, G.H., Colombo, R., Middleton, E.M., Rascher, U., van der Tol, C., Nedbal, L., Goulas, Y., Pérez-Priego, O., Damm, A. and Meroni, M., 2019. Remote sensing of solar-induced chlorophyll fluorescence (SIF) in vegetation: 50 years of progress. *Remote sensing of environment*, 231: 111177.
- Mousivand, A., Menenti, M., Gorte, B. and Verhoef, W., 2014. Global sensitivity analysis of the spectral radiance of a soil-vegetation system. *Remote Sensing of Environment*, 145: 131-144.
- Moustakas, M., Sperdoui, I. and Moustaka, J., 2022. Early Drought Stress Warning in Plants: Color Pictures of Photosystem II Photochemistry. *Climate*, 10(11): 179.
- Norton, A.J., Rayner, P.J., Koffi, E.N. and Scholze, M., 2018. Assimilating solar-induced chlorophyll fluorescence into the terrestrial biosphere model BETHY-SCOPE v1. 0: model description and information content. *Geoscientific Model Development*, 11(4): 1517-1536.
- Palombi, L., Cecchi, G., Lognoli, D., Raimondi, V., Toci, G. and Agati, G., 2011. A retrieval algorithm to evaluate the Photosystem I and Photosystem II spectral contributions to leaf chlorophyll fluorescence at physiological temperatures. *Photosynthesis research*, 108: 225-239.
- Parazoo, N.C., Magney, T., Norton, A., Raczka, B., Bacour, C., Maignan, F., Baker, I., Zhang, Y., Qiu, B. and Shi, M., 2020. Wide discrepancies in the magnitude and direction of modeled solar-induced chlorophyll fluorescence in response to light conditions. *Biogeosciences*, 17(13): 3733-3755.
- Pedrós, R., Goulas, Y., Jacquemoud, S., Louis, J. and Moya, I., 2010. FluorMODleaf: A new leaf fluorescence emission model based on the PROSPECT model. *Remote Sensing of Environment*, 114(1): 155-167.
- Pei, H., Min, L., Qi, Y., Liu, X., Jia, Y., Shen, Y. and Liu, C., 2017. Impacts of varied irrigation on field water budgets and crop yields in the North China Plain: Rainfed vs. irrigated double cropping system. *Agricultural water management*, 190: 42-54.
- Peng, B., Guan, K., Chen, M., Lawrence, D.M., Pokhrel, Y., Suyker, A., Arkebauer, T. and Lu, Y., 2018. Improving maize growth processes in the community land model: Implementation and evaluation. *Agricultural and forest meteorology*, 250: 64-89.
- Pfündel, E., 1998. Estimating the contribution of photosystem I to total leaf chlorophyll fluorescence. *Photosynthesis research*, 56: 185-195.
- Poli, R., Kennedy, J. and Blackwell, T., 2007. Quantification & assessment of the chemical form of residual gadolinium in the brain. *Swarm Intell*, 1(1): 33-57.
- Porcar-Castell, A., Tyystjärvi, E., Atherton, J., Van der Tol, C., Flexas, J., Pfündel, E.E., Moreno, J., Frankenberg, C. and Berry, J.A., 2014. Linking chlorophyll a fluorescence to photosynthesis for remote sensing applications: mechanisms and challenges. *Journal of experimental botany*, 65(15): 4065-4095.
- Qiu, B., Chen, J.M., Ju, W., Zhang, Q. and Zhang, Y., 2019. Simulating emission and scattering of solar-induced chlorophyll fluorescence at far-red band in global vegetation with different canopy structures. *Remote Sensing of Environment*, 233: 111373.
- Reichstein, M., Falge, E., Baldocchi, D., Papale, D., Aubinet, M., Berbigier, P., Bernhofer, C., Buchmann, N., Gilmanov, T. and Granier, A., 2005. On the separation of net ecosystem exchange into assimilation and ecosystem respiration: review and improved algorithm. *Global change biology*, 11(9): 1424-1439.
- Romero, J.M., Cordon, G.B. and Lagorio, M.G., 2018. Modeling re-absorption of fluorescence from the leaf to the canopy level. *Remote Sensing of Environment*, 204: 138-146.
- Romero, J.M., Cordon, G.B. and Lagorio, M.G., 2020. Re-absorption and scattering of chlorophyll fluorescence

- in canopies: A revised approach. *Remote Sensing of Environment*, 246: 111860.
- Sakai, Y., Kobayashi, H. and Kato, T., 2020. FLiES-SIF version 1.0: three-dimensional radiative transfer model for estimating solar induced fluorescence. *Geoscientific Model Development*, 13(9): 4041-4066.
- Saxton, K., Rawls, W.J., Romberger, J.S. and Papendick, R., 1986. Estimating generalized soil - water characteristics from texture. *Soil science society of America Journal*, 50(4): 1031-1036.
- Schreiber, U., Schliwa, U. and Bilger, W., 1986. Continuous recording of photochemical and non-photochemical chlorophyll fluorescence quenching with a new type of modulation fluorometer. *Photosynthesis research*, 10: 51-62.
- Shangguan, W., Dai, Y., Duan, Q., Liu, B. and Yuan, H., 2014. A global soil data set for earth system modeling. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 6(1): 249-263.
- Sinclair, T.R. and Horie, T., 1989. Leaf nitrogen, photosynthesis, and crop radiation use efficiency: a review. *Crop science*, 29(1): 90-98.
- Sinclair, T.R. and Muchow, R.C., 1999. Radiation use efficiency. *Advances in agronomy*, 65: 215-265.
- Smith, A.B. and Matthews, J.L., 2015. Quantifying uncertainty and variable sensitivity within the US billion-dollar weather and climate disaster cost estimates. *Natural Hazards*, 77: 1829-1851.
- Song, L., Guanter, L., Guan, K., You, L., Huete, A., Ju, W. and Zhang, Y., 2018. Satellite sun - induced chlorophyll fluorescence detects early response of winter wheat to heat stress in the Indian Indo - Gangetic Plains. *Global change biology*, 24(9): 4023-4037.
- Sternberg, T., 2011. Regional drought has a global impact. *Nature*, 472(7342): 169-169.
- Stocker, T.F., Qin, D., Plattner, G., Tignor, M., Allen, S., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V. and Midgley, P., 2013. Contribution of working group I to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change. *Climate change*, 5: 1-1552.
- Strahler, A.H., Muller, J., Lucht, W., Schaaf, C., Tsang, T., Gao, F., Li, X., Lewis, P. and Barnsley, M.J., 1999. MODIS BRDF/albedo product: algorithm theoretical basis document version 5.0. MODIS documentation, 23(4): 42-47.
- Sun, Y., Frankenberg, C., Jung, M., Joiner, J., Guanter, L., Köhler, P. and Magney, T., 2018. Overview of Solar-Induced chlorophyll Fluorescence (SIF) from the Orbiting Carbon Observatory-2: Retrieval, cross-mission comparison, and global monitoring for GPP. *Remote Sensing of Environment*, 209: 808-823.
- Sun, Y., Frankenberg, C., Wood, J.D., Schimel, D., Jung, M., Guanter, L., Drewry, D., Verma, M., Porcar-Castell, A. and Griffis, T.J., 2017. OCO-2 advances photosynthesis observation from space via solar-induced chlorophyll fluorescence. *Science*, 358(6360): eaam5747.
- Suyker, A.E. and Verma, S.B., 2012. Gross primary production and ecosystem respiration of irrigated and rainfed maize-soybean cropping systems over 8 years. *Agricultural and Forest Meteorology*, 165: 12-24.
- Suyker, A.E., Verma, S.B., Burba, G.G. and Arkebauer, T.J., 2005. Gross primary production and ecosystem respiration of irrigated maize and irrigated soybean during a growing season. *Agricultural and Forest Meteorology*, 131(3-4): 180-190.
- Svoboda, M., LeCompte, D., Hayes, M., Heim, R., Gleason, K., Angel, J., Rippey, B., Tinker, R., Palecki, M. and Stooksbury, D., 2002. The drought monitor. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 83(8): 1181-1190.
- Thornton, P., Thornton, M. and Vose, R., 2017. Daymet: annual tile summary cross-validation statistics for North America, Version 3. ORNL DAAC.
- Ummenhofer, C.C., England, M.H., McIntosh, P.C., Meyers, G.A., Pook, M.J., Risbey, J.S., Gupta, A.S. and Taschetto, A.S., 2009. What causes southeast Australia's worst droughts? *Geophysical Research Letters*, 36(4).

- Van der Tol, C., Berry, J., Campbell, P. and Rascher, U., 2014. Models of fluorescence and photosynthesis for interpreting measurements of solar - induced chlorophyll fluorescence. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 119(12): 2312-2327.
- Van der Tol, C., Verhoef, W., Timmermans, J., Verhoef, A. and Su, Z., 2009. An integrated model of soil-canopy spectral radiances, photosynthesis, fluorescence, temperature and energy balance. *Biogeosciences*, 6(12): 3109-3129.
- van der Tol, C., Vilfan, N., Dauwe, D., Cendrero-Mateo, M.P. and Yang, P., 2019. The scattering and re-absorption of red and near-infrared chlorophyll fluorescence in the models Fluspect and SCOPE. *Remote sensing of environment*, 232: 111292.
- Verma, M., Schimel, D., Evans, B., Frankenberg, C., Beringer, J., Drewry, D.T., Magney, T., Marang, I., Hutley, L. and Moore, C., 2017. Effect of environmental conditions on the relationship between solar - induced fluorescence and gross primary productivity at an OzFlux grassland site. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 122(3): 716-733.
- Verrelst, J., Rivera, J.P., van der Tol, C., Magnani, F., Mohammed, G. and Moreno, J., 2015. Global sensitivity analysis of the SCOPE model: What drives simulated canopy-leaving sun-induced fluorescence? *Remote Sensing of Environment*, 166: 8-21.
- Verrelst, J., van der Tol, C., Magnani, F., Sabater, N., Rivera, J.P., Mohammed, G. and Moreno, J., 2016. Evaluating the predictive power of sun-induced chlorophyll fluorescence to estimate net photosynthesis of vegetation canopies: A SCOPE modeling study. *Remote Sensing of Environment*, 176: 139-151.
- Vilfan, N., Van der Tol, C., Muller, O., Rascher, U. and Verhoef, W., 2016. Fluspect-B: A model for leaf fluorescence, reflectance and transmittance spectra. *Remote Sensing of Environment*, 186: 596-615.
- Von Caemmerer, S., 2000. *Biochemical models of leaf photosynthesis*. Csiro publishing.
- Walker, D., Epstein, H., Reynolds, M., Kuss, P., Kopecky, M., Frost, G., Daniëls, F., Leibman, M., Moskalenko, N. and Matyshak, G., 2012. Environment, vegetation and greenness (NDVI) along the North America and Eurasia Arctic transects. *Environmental Research Letters*, 7(1): 015504.
- Wang, C., Guan, K., Peng, B., Chen, M., Jiang, C., Zeng, Y., Wu, G., Wang, S., Wu, J. and Yang, X., 2020. Satellite footprint data from OCO-2 and TROPOMI reveal significant spatio-temporal and inter-vegetation type variabilities of solar-induced fluorescence yield in the US Midwest. *Remote Sensing of Environment*, 241: 111728.
- Wang, E., Brown, H.E., Rebetzke, G.J., Zhao, Z., Zheng, B. and Chapman, S.C., 2019. Improving process-based crop models to better capture genotype× environment× management interactions. *Journal of experimental botany*, 70(9): 2389-2401.
- Wang, J., Yang, Y., Huang, J. and Chen, K., 2015. Information provision, policy support, and farmers' adaptive responses against drought: An empirical study in the North China Plain. *Ecological modelling*, 318: 275-282.
- Williams, A.P., Seager, R., Abatzoglou, J.T., Cook, B.I., Smerdon, J.E. and Cook, E.R., 2015. Contribution of anthropogenic warming to California drought during 2012–2014. *Geophysical Research Letters*, 42(16): 6819-6828.
- Wohlfahrt, G., Gerdel, K., Migliavacca, M., Rotenberg, E., Tatarinov, F., Müller, J., Hammerle, A., Julitta, T., Spielmann, F. and Yakir, D., 2018. Sun-induced fluorescence and gross primary productivity during a heat wave. *Scientific reports*, 8(1): 1-9.
- Wu, A., Hammer, G.L., Doherty, A., von Caemmerer, S. and Farquhar, G.D., 2019. Quantifying impacts of enhancing photosynthesis on crop yield. *Nature plants*, 5(4): 380-388.
- Wutzler, T., Lucas-Moffat, A., Migliavacca, M., Knauer, J., Sickel, K., Šigut, L., Menzer, O. and Reichstein, M.,

2018. Basic and extensible post-processing of eddy covariance flux data with REddyProc. *Biogeosciences*, 15(16): 5015-5030.
- Xu, S., Atherton, J., Riikonen, A., Zhang, C., Oivukkamäki, J., MacArthur, A., Honkavaara, E., Hakala, T., Koivumäki, N. and Liu, Z., 2021. Structural and photosynthetic dynamics mediate the response of SIF to water stress in a potato crop. *Remote Sensing of Environment*, 263: 112555.
- Xue, J. and Su, B., 2017. Significant remote sensing vegetation indices: A review of developments and applications. *Journal of sensors*, 2017.
- Yang, P., Prikaziuk, E., Verhoef, W. and van Der Tol, C., 2021. SCOPE 2.0: A model to simulate vegetated land surface fluxes and satellite signals. *Geoscientific Model Development*, 14(7): 4697-4712.
- Yang, P. and van der Tol, C., 2018. Linking canopy scattering of far-red sun-induced chlorophyll fluorescence with reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 209: 456-467.
- Yang, P., van der Tol, C., Campbell, P.K. and Middleton, E.M., 2020. Fluorescence Correction Vegetation Index (FCVI): A physically based reflectance index to separate physiological and non-physiological information in far-red sun-induced chlorophyll fluorescence. *Remote sensing of environment*, 240: 111676.
- Yang, P., Verhoef, W. and van der Tol, C., 2017. The mSCOPE model: A simple adaptation to the SCOPE model to describe reflectance, fluorescence and photosynthesis of vertically heterogeneous canopies. *Remote sensing of environment*, 201: 1-11.
- Yang, X., Tang, J., Mustard, J.F., Lee, J.E., Rossini, M., Joiner, J., Munger, J.W., Kornfeld, A. and Richardson, A.D., 2015. Solar - induced chlorophyll fluorescence that correlates with canopy photosynthesis on diurnal and seasonal scales in a temperate deciduous forest. *Geophysical Research Letters*, 42(8): 2977-2987.
- Yu, C., 2011. China's water crisis needs more than words. *Nature*, 470(7334): 307-307.
- Zarco-Tejada, P.J., Pushnik, J., Dobrowski, S. and Ustin, S., 2003. Steady-state chlorophyll a fluorescence detection from canopy derivative reflectance and double-peak red-edge effects. *Remote Sensing of Environment*, 84(2): 283-294.
- Zargar, A., Sadiq, R., Naser, B. and Khan, F.I., 2011. A review of drought indices. *Environmental Reviews*, 19(NA): 333-349.
- Zeng, Y., Badgley, G., Dechant, B., Ryu, Y., Chen, M. and Berry, J.A., 2019. A practical approach for estimating the escape ratio of near-infrared solar-induced chlorophyll fluorescence. *Remote Sensing of Environment*, 232: 111209.
- Zhang, Y., Guanter, L., Berry, J.A., Joiner, J., van der Tol, C., Huete, A., Gitelson, A., Voigt, M. and Köhler, P., 2014. Estimation of vegetation photosynthetic capacity from space - based measurements of chlorophyll fluorescence for terrestrial biosphere models. *Global change biology*, 20(12): 3727-3742.
- Zhang, Y., Xiao, X., Zhang, Y., Wolf, S., Zhou, S., Joiner, J., Guanter, L., Verma, M., Sun, Y. and Yang, X., 2018. On the relationship between sub-daily instantaneous and daily total gross primary production: Implications for interpreting satellite-based SIF retrievals. *Remote Sensing of Environment*, 205: 276-289.
- Zhang, Z., Chen, J.M., Guanter, L., He, L. and Zhang, Y., 2019. From canopy - leaving to total canopy far - red fluorescence emission for remote sensing of photosynthesis: First results from TROPOMI. *Geophysical Research Letters*, 46(21): 12030-12040.
- Zhang, Z., Zhang, X., Porcar-Castell, A., Chen, J.M., Ju, W., Wu, L., Wu, Y. and Zhang, Y., 2022. Sun-induced chlorophyll fluorescence is more strongly related to photosynthesis with hemispherical than nadir measurements: Evidence from field observations and model simulations. *Remote Sensing of Environment*, 279: 113118.
- Zhang, Z., Zhang, Y., Chen, J.M., Ju, W., Migliavacca, M. and El-Madany, T.S., 2021. Sensitivity of estimated total canopy SIF emission to remotely sensed LAI and BRDF products. *Journal of Remote Sensing*, 2021.

- Zhao, F., Dai, X., Verhoef, W., Guo, Y., van der Tol, C., Li, Y. and Huang, Y., 2016. FluorWPS: A Monte Carlo ray-tracing model to compute sun-induced chlorophyll fluorescence of three-dimensional canopy. *Remote Sensing of Environment*, 187: 385-399.
- Zhao, F., Gu, X., Verhoef, W., Wang, Q., Yu, T., Liu, Q., Huang, H., Qin, W., Chen, L. and Zhao, H., 2010. A spectral directional reflectance model of row crops. *Remote Sensing of Environment*, 114(2): 265-285.
- Zhao, F., Li, Y., Dai, X., Verhoef, W., Guo, Y., Shang, H., Gu, X., Huang, Y., Yu, T. and Huang, J., 2015. Simulated impact of sensor field of view and distance on field measurements of bidirectional reflectance factors for row crops. *Remote Sensing of Environment*, 156: 129-142.
- Zhao, F. and Ni, Q., 2018. a Model to Simulate the Radiative Transfer of Fluorescence in a Leaf. *ISPRS-International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences*, 42: 2347-2351.
- Zhao, F., Yuan, J., Huang, Y., Magney, T.S. and Porcar-Castell, A., 2020. Preliminary Study of Wavelength Positions of Leaf Fluorescence Peaks with Experimental Data, *IGARSS 2020-2020 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. IEEE, pp. 4838-4841.
- Zou, T. and Zhang, J., 2020. A New Fluorescence Quantum Yield Efficiency Retrieval Method to Simulate Chlorophyll Fluorescence under Natural Conditions. *Remote Sensing*, 12(24): 4053.

致谢

时光荏苒，岁月如梭，四年的博士生涯马上就要结束了。在这极不平凡的四年带给我太多的感动与启发，在此，我对那些陪伴我，关心我，支持我的人们，深深的表示感谢。

首先感谢的是我的导师吕肖良老师。在我进入博士生活的第一天，他就向我展示了一种独特的学习和思考方式。吕老师对学术研究的深入热情和专业态度一直都是我学术生涯的榜样。他永远不会对我的疑问感到厌烦，而是耐心地给出意见并鼓励我，为我提供了无限的帮助和支持。同时，我也非常感谢我的联合指导导师于强老师，感谢于老师为我提供了一个开拓的平台，在这个平台上我不断的学习和成长。他用自己的人生经历，激励我勤奋学习和刻苦钻研。他的严格要求和指导使我逐渐形成了系统的研究方法论和深厚的学术素养。非常喜欢和于老师的促膝长谈，从他身上我学到了热爱学术、不断追求创新的精神和方法。感谢课题组刘准桥老师在科研与生活中提供的帮助。感谢生态模拟团队里岳超老师、何建强老师、李毅老师、王靖老师、冯璞玉老师、刘德立老师、齐雁冰老师在博士科研工作中给我提供的宝贵意见与建议。感谢王恩利老师、刘伟伟老师和高思聪老师在辐射传输模型和作物模型使用上提供的帮助。感谢刘良云老师、刘新杰老师、赵峰老师、曾也鲁老师在 SIF 数据和理论知识提供的帮助。

其次，我要感谢我的博士阶段中认识的小伙伴们，感谢他们在科研和学习上的帮助。感谢贾倩兰、郭晨辉和我在烈烈骄阳下一同奋斗做实验，感谢薛金儒、杨晶晶、闫雨杏、金晓倩、柏延文、高焕霖、彭雄标、陈若楠和我分享知识及技能，感谢同届的小伙伴李林超、何沁锶、戎亮秉、李莎莎、常凤、吕丽慧、李嘉、包蕾在科研上的相互帮助、相互学习以及生活中带给我的欢乐，感谢生态模拟团队的赵杰、张艳、金朝、庄伟、田琪、王欢欢、谭姣姣、史丽洁、王云霏等让我感受到团队协作的重要性和对个人成长的促进作用。你们是我的队友和战友，思想和方法上的碰撞促进了我在研究方面不断取得进步。

再次，我要感谢我的母校和相关部门，感谢他们给予我的学习和成长的机会。在这个庞大的校园中，我感受到了浓郁的学术氛围和严谨的学风。母校培养了我这样一个完整的人，让我更好的了解社会和认识自我。而各部门也为我提供了不同层次的服务和支持，使我能够更好的完成自己的学业和研究。

最后，我要感谢我的家人和朋友们，尤其是我的女朋友苏寒在我博士生涯中的陪伴与理解，感谢他们一直以来的支持和鼓励。在我求学的路上，他们给我提供了精神上的支持和物质上的帮助。他们鼓励我不断进取，做一个优秀的人，做一个有用的人。也正是有了他们的支持，我才能够在学习中感受到家的温馨和友人的真情。感恩之情溢

于言表。

在这条无涯的学海中，我用一艘小舟在颠簸和坚毅中向前。尽管我已经毕业，但我的学习生涯还未结束。我要继续坚定前行，不断前行，追求知识和技能的升华，追求自我的提升和成长。愿每一位追逐梦想的人都能读到自己的人生华章。

2023年5月9日

水保所

个人简介

一、个人简介

王亚凯，男，汉族，1993年5月出生在河北石家庄，中共党员。研究方向为作物模型与遥感。

1. 2019.09-2023.06，就读于西北农林科技大学资源环境学院土地资源与空间信息技术专业，攻读博士学位。
2. 2016.09-2019.06，就读于中国科学院大学遗传与发育生物学研究所农业资源研究中心生态学专业，攻读硕士学位。
3. 2012.09-2016.06，就读于成都理工大学材料与化学化工学院生物工程专业，攻读学士学位。

二、博士期间发表文章

(1) **Wang, Y.**, Liu, Z., Yu, Q., Liu, L., Liu, X., Li, L., Jia, Q., Guo, C. and Lu, X., 2022. Simulations of solar-induced chlorophyll fluorescence over crop canopies using the integrated APSIM model. *Computers and Electronics in Agriculture*, 203: 107494.

(2) Gao, S., Huete, A., Kobayashi, H., Doody, T.M., Liu, W., **Wang, Y.**, Zhang, Y. and Lu, X., 2022. Simulation of solar-induced chlorophyll fluorescence in a heterogeneous forest using 3-D radiative transfer modelling and airborne LiDAR. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 191: 1-17.

(3) Li, L., Wang, B., Feng, P., Wang, H., He, Q., **Wang, Y.**, Li Liu, D., Li, Y., He, J. and Feng, H., 2021. Crop yield forecasting and associated optimum lead time analysis based on multi-source environmental data across China. *Agricultural and Forest Meteorology*, 308: 108558.

(4) Li, L., Wang, B., Feng, P., Li Liu, D., He, Q., Zhang, Y., **Wang, Y.**, Li, S., Lu, X. and Yue, C., 2022. Developing machine learning models with multi-source environmental data to predict wheat yield in China. *Computers and Electronics in Agriculture*, 194: 106790.

(5) 闫雨杏, 吕肖良, **王亚凯** 和 于强, 2023. 日光诱导叶绿素荧光研究及应用的文献计量分析. *中国农业气象*, 44(02): 106-122.

三、博士期间学术交流

- (1) 2019年10月21-22日，参加华东师范大学崇明生态研究院举办的2019

植被日光诱导荧光(SIF)研讨会:

(2) 2020年8月12-13日,线上参加中国农业大学资源与环境学院系统模拟与软件技术实验室举办的2020第二届农业系统模拟与农业气象暑期学校;

(3) 2021年7月19-25日,线上参加北京师范大学地理科学学部遥感科学与工程研究院举办的2021第十一届陆表卫星遥感数据反演理论与方法暑期学校,并被评选为优秀学员;

(4) 2022年12月17-18日,线上参加南京师范大学主办的2022第十届全国地理信息科学博士生学术论坛,并将本论文研究成果在定量遥感前沿分会场所作报告。