

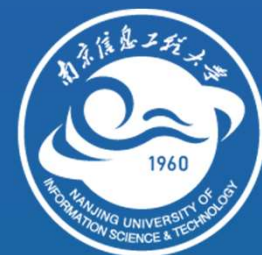
ChinaFLUX第十六次通量观测理论与技术培训

氢氧稳定同位素通量观测 的基本理论与技术方法

肖 薇

2021年8月18-19日 线上直播

明德格物 立己达人



南京信息工程大学
Nanjing University of Information Science & Technology

目录

CONTENTS



1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
3. 蒸散同位素组分的观测方法
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
6. 研究展望

目录

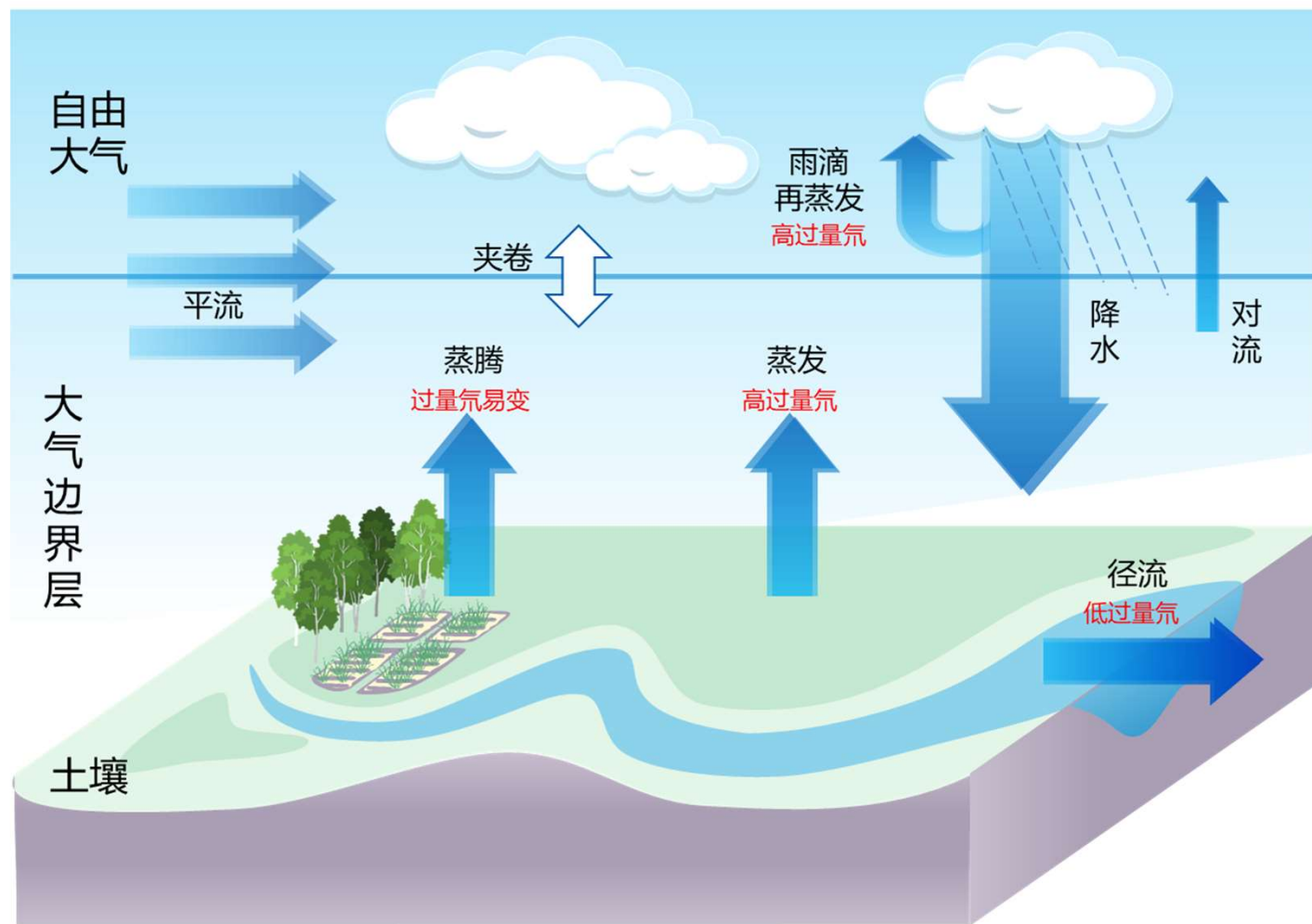
CONTENTS



南京信息工程大学
Nanjing University of Information Science & Technology

1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
3. 蒸散同位素组分的观测方法
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
6. 研究展望

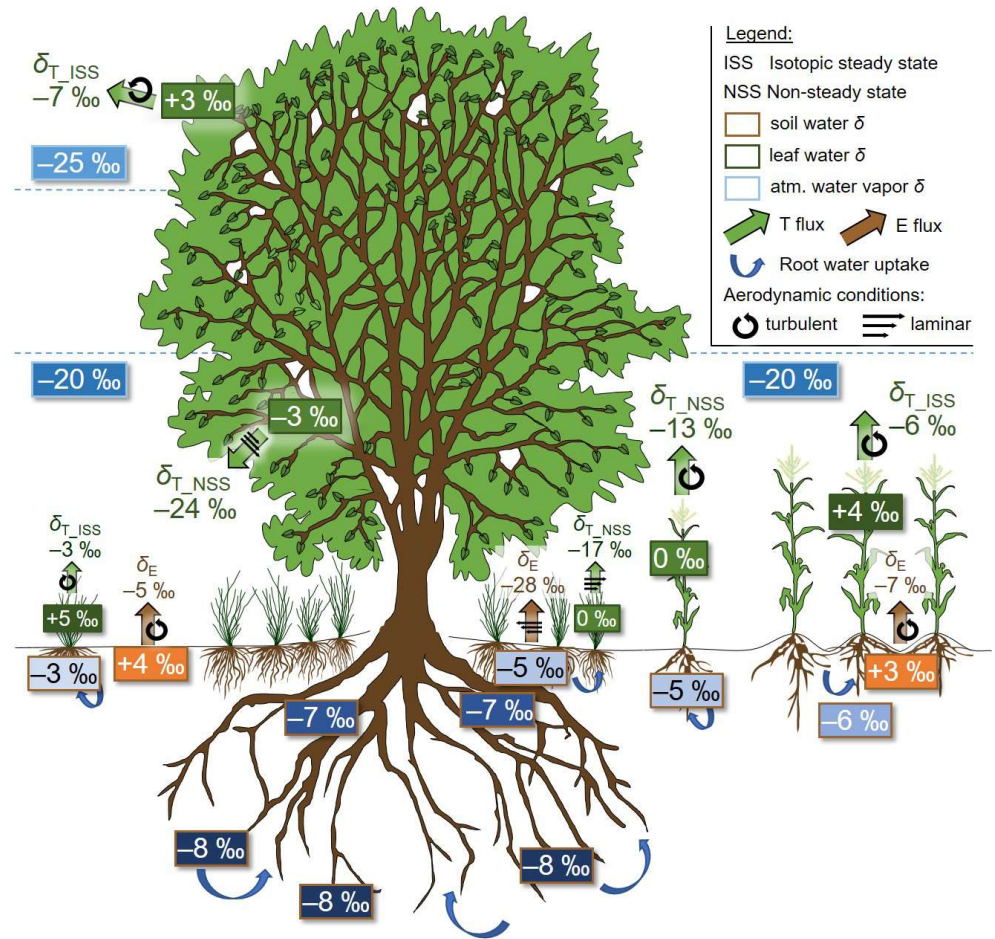
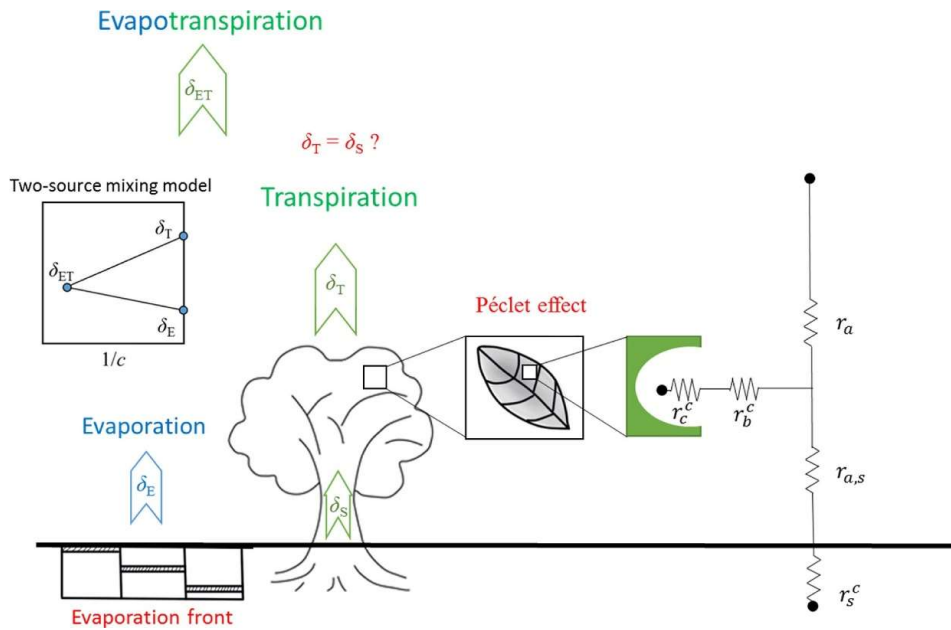
局地水循环中土壤、大气边界层和自由大气中水交换过程



(肖薇, 2021)

生态系统水体和水汽通量的同位素组分

$$T/ET = \frac{\delta_{ET} - \delta_E}{\delta_T - \delta_E}$$



(Xiao et al. 2018; Rothfuss et al. 2021)

目录

CONTENTS



1. 研究背景
- 2. 水汽同位素的观测方法**
3. 蒸散同位素组分的观测方法
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
6. 研究展望

冷阱采样-同位素质谱仪联用

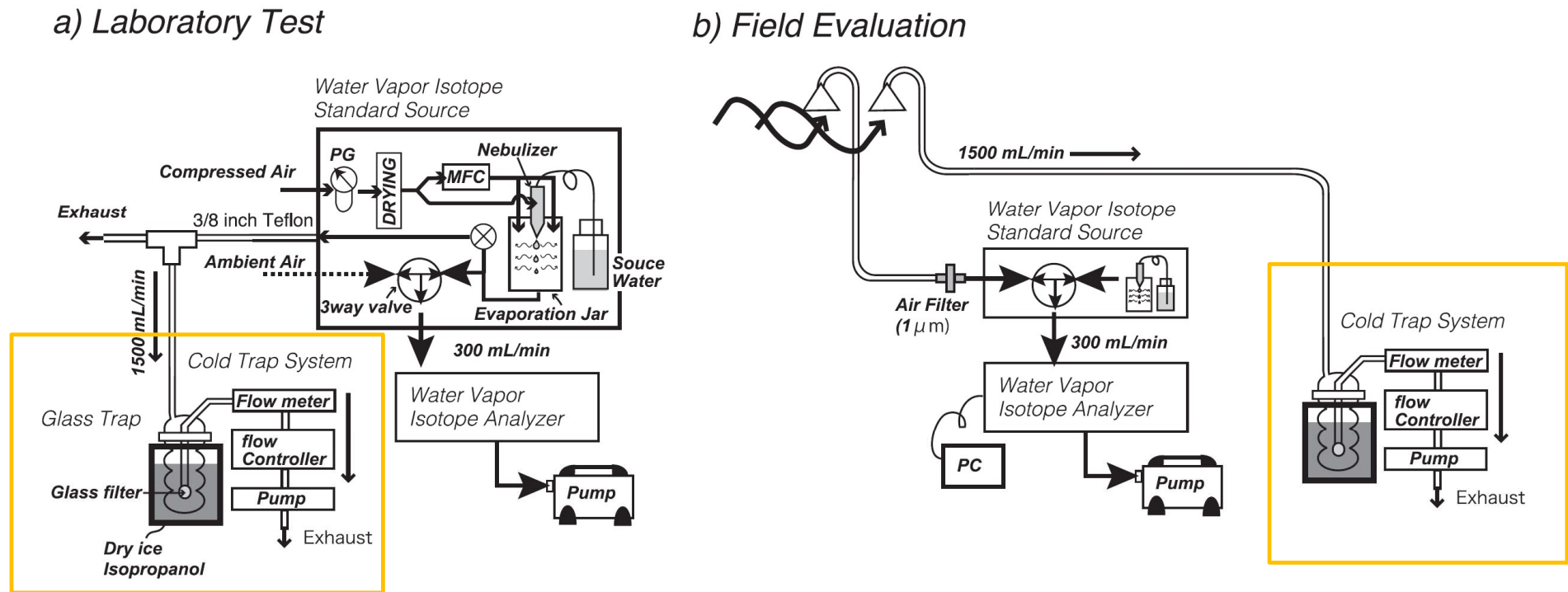
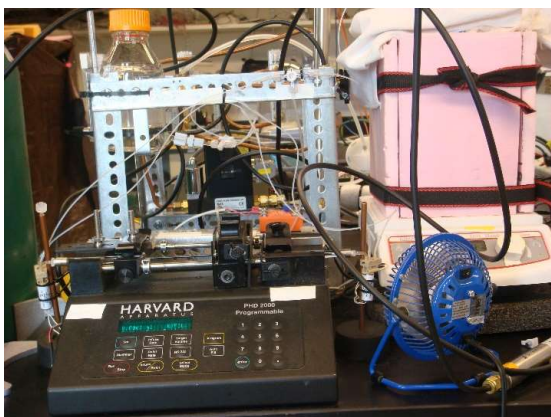
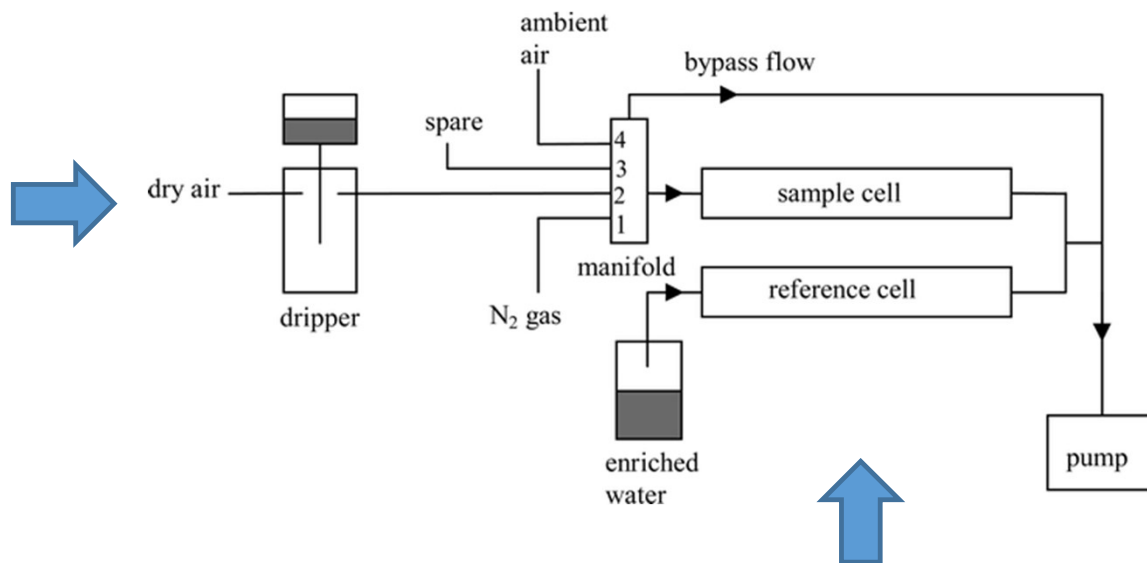


Fig. 1. Experimental setup for (a) laboratory test and (b) field evaluation.

基于红外同位素光谱仪的水汽同位素在线连续观测



水汽同位素标定系统
(Designed by Prof. Xuhui Lee)



**首次实现了用红外同位素光谱仪
原位在线观测水汽同位素**

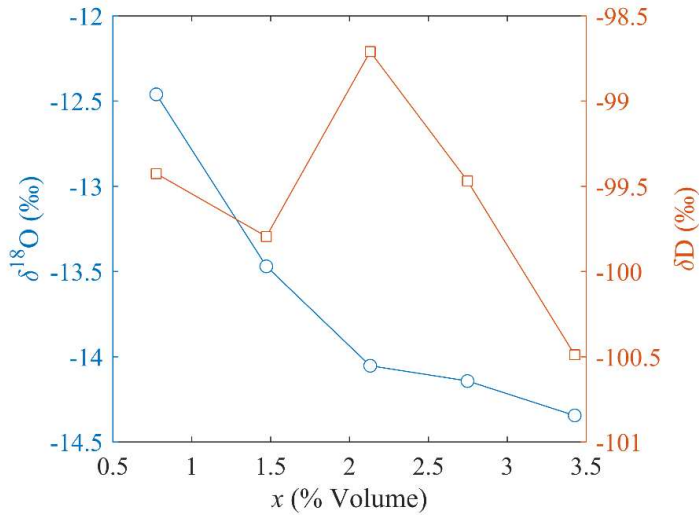


Campbell
Scientific TDL
trace gas analyzer

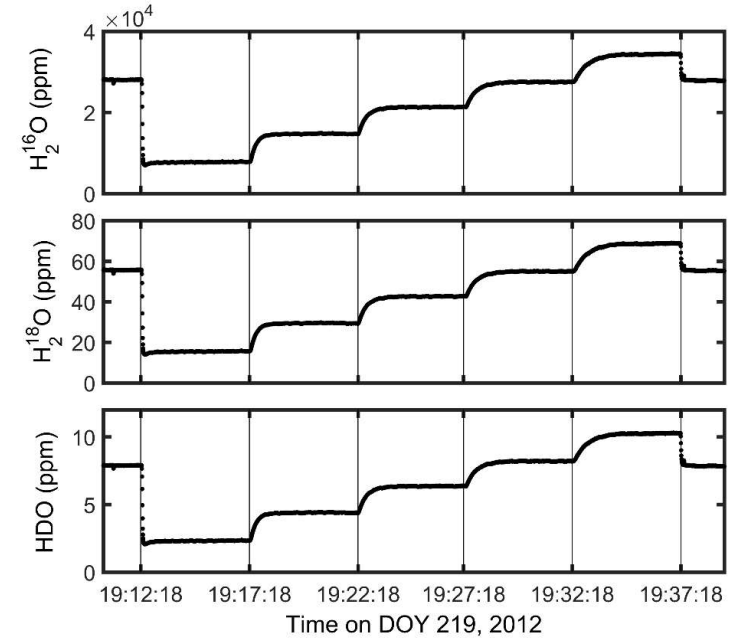
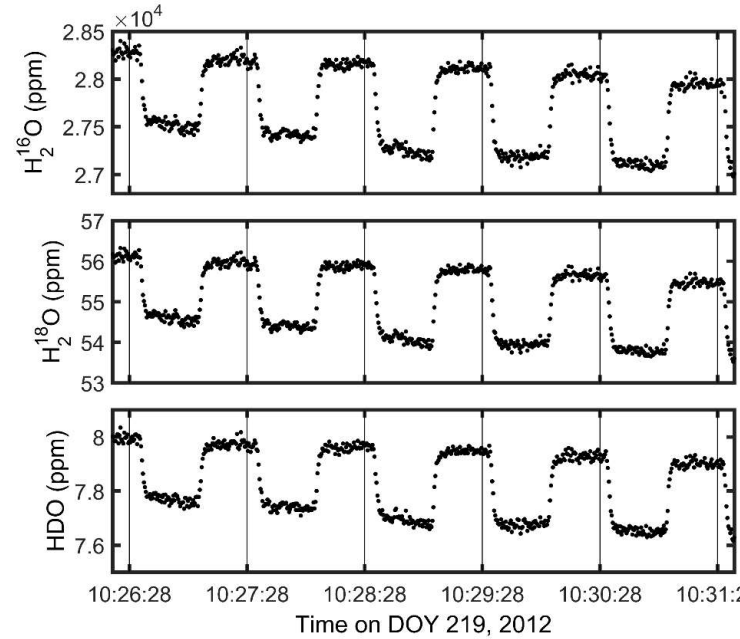
(Lee et al. 2005)

水汽同位素组分观测的标定

浓度依赖性 (非线性问题)



标定方法



$$R_1 = R_S \cdot \frac{x_{s,1}}{x'_{s,1}} \cdot \frac{x'_a}{x_a}$$

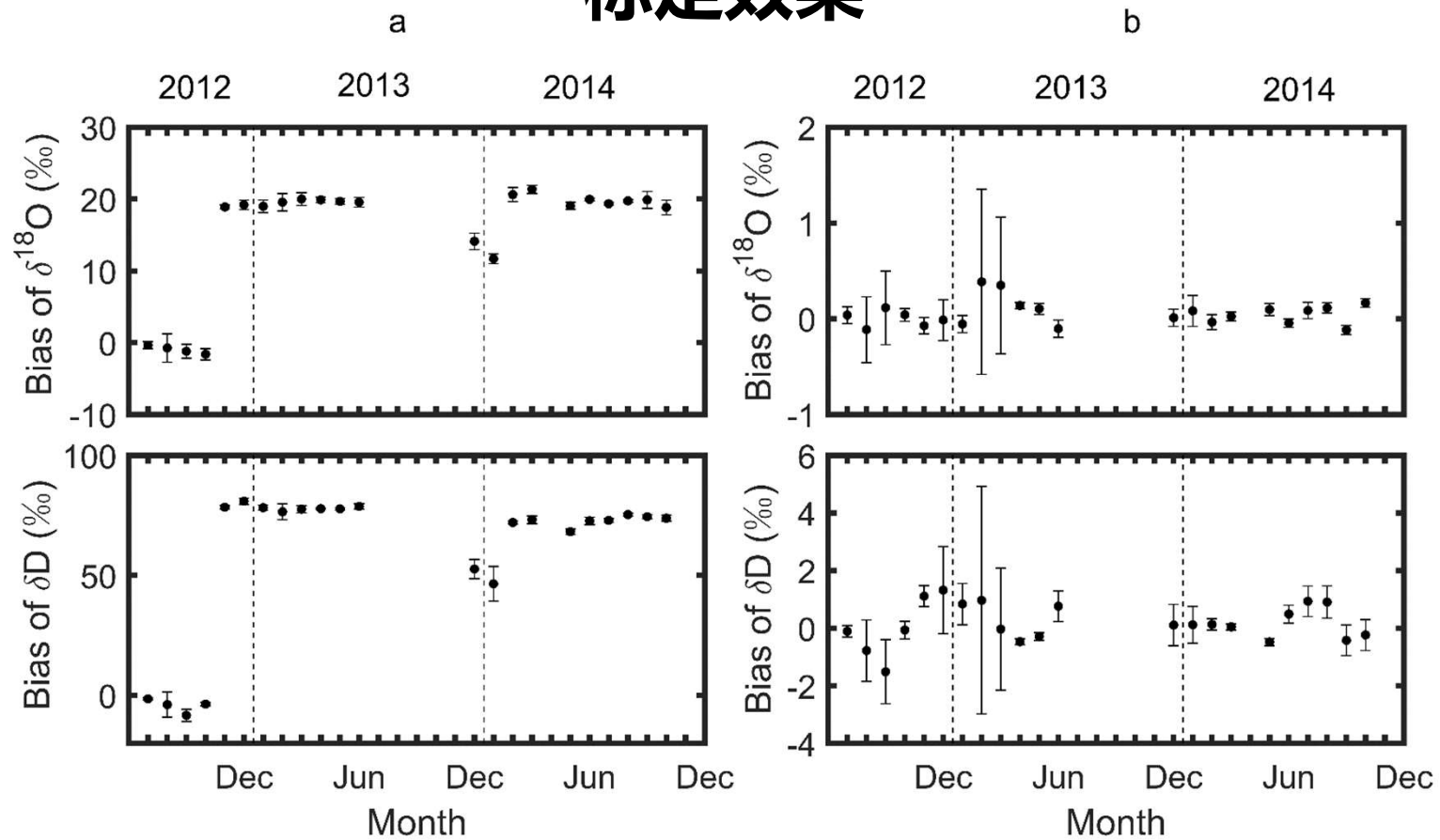
$$R_2 = R_S \cdot \frac{x_{s,2}}{x'_{s,2}} \cdot \frac{x'_a}{x_a}$$

$$\delta_V = \delta_1 + \frac{\delta_2 - \delta_1}{x_{s,2} - x_{s,1}} (x_a - x_{s,1})$$

(Xiao et al. 2017)

2. 水汽同位素组分的观测

标定效果



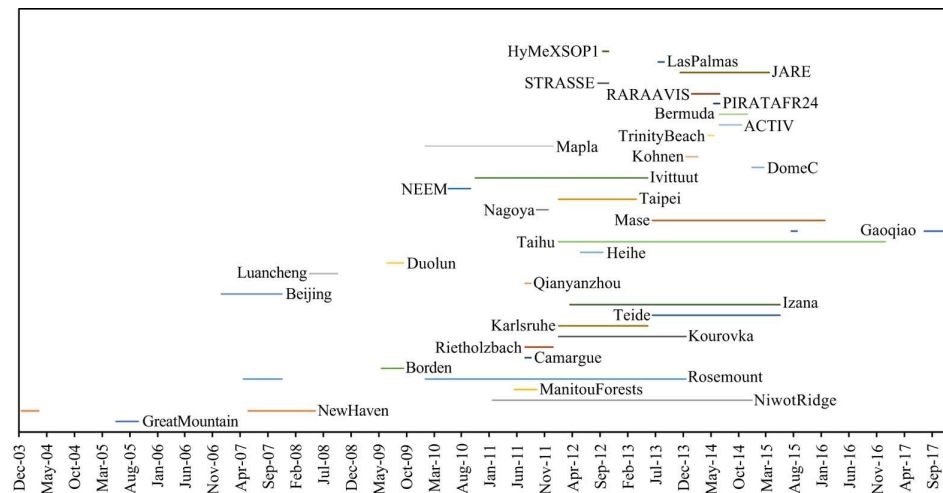
(Xiao et al. 2017)

Stable Water Vapor Isotopes Database

HOME DATA POLICY DATA DOWNLOAD PUBLICATIONS CONTACT US



<https://vapor-isotope.yale.edu/>



(Wei et al. 2019)

目录

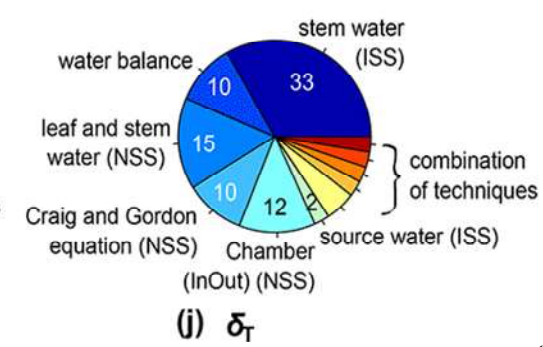
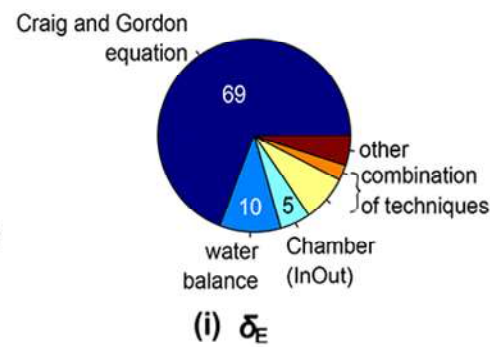
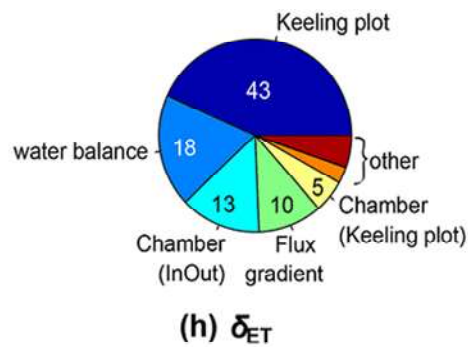
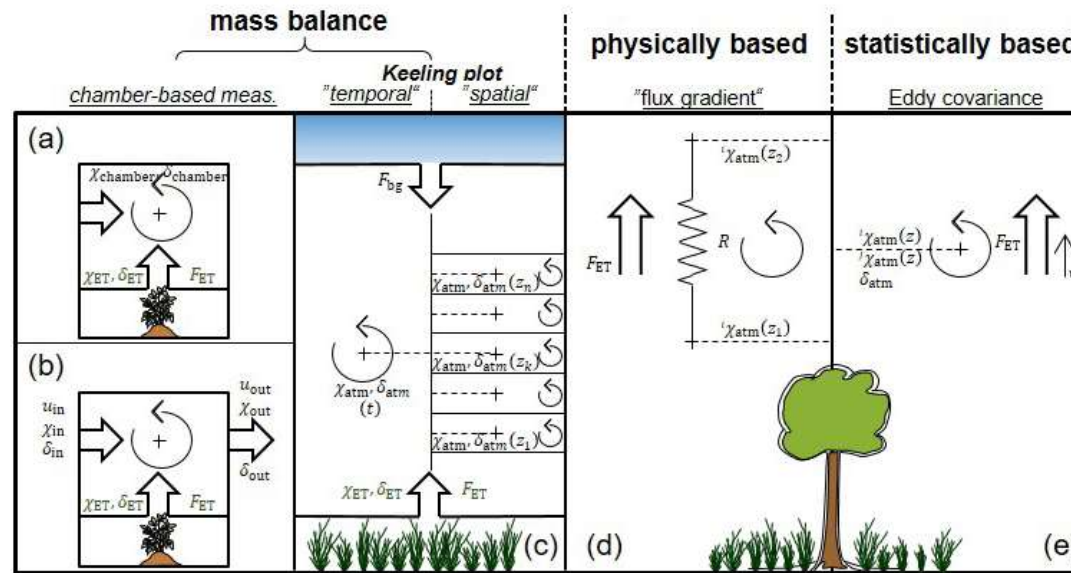
CONTENTS



南京信息工程大学
Nanjing University of Information Science & Technology

1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
- 3. 蒸散同位素组分的观测方法**
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
6. 研究展望

水汽通量同位素组分的观测方法



(Rothfuss et al. 2021)

3.1 Keeling曲线法

$$C_V = C_{bg} + C_{ET}$$

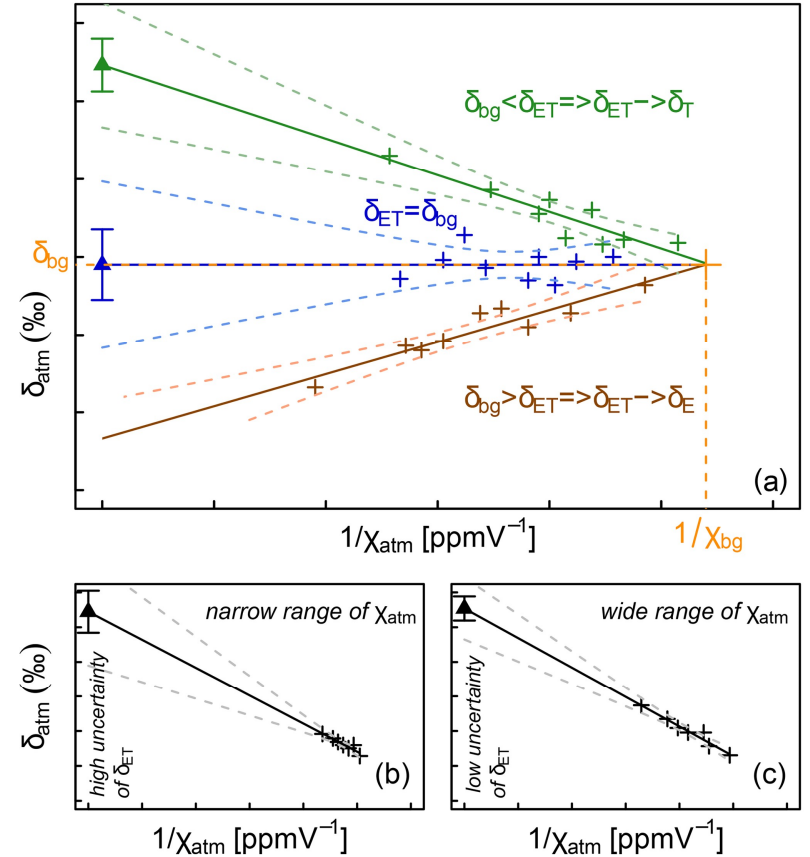
$$C_V \delta_V = C_{bg} \delta_{bg} + C_{ET} \delta_{ET}$$



$$\delta_V = \chi_{bg}(\delta_{bg} - \delta_{ET})(1 / \chi_V) + \delta_{ET}$$

前提假设:

- (1) 大气水汽只有两个来源：生态系统蒸散和背景大气
- (2) 大气水汽同位素的变化和水汽浓度的变化仅受表面蒸发的影响
- (3) 在回归时段时段内 C_{bg} , δ_{bg} 和 δ_E 不变



(Keeling et al. 1958; Hu et al. 2021; Rothfuss et al. 2021)

3.1 Keeling曲线法

观测仪器:

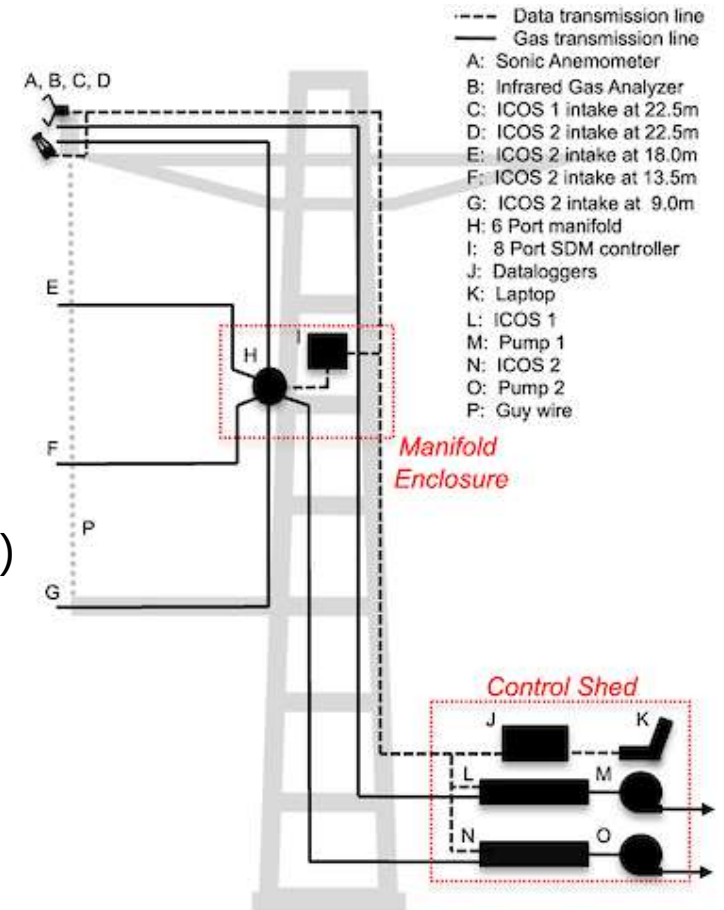
- (1) 冷阱-同位素质谱仪联用
- (2) 红外同位素光谱仪

观测方法:

- (1) 仅在一个高度上观测 (Temporal Keeling Plot)
- (2) 在短时间内 (约1h) 在不同高度观测 (Spatial Keeling Plot)

其他类似方法:

Miller-Tans法 $c\delta_v = d + a(c - c_0)$



(Good et al. 2012; Miller & Tans 2003; Rothfuss et al. 2021)

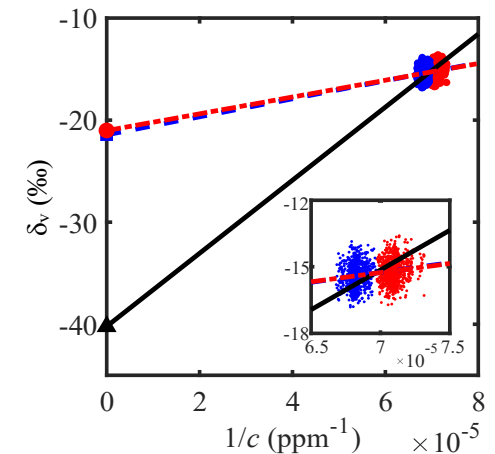
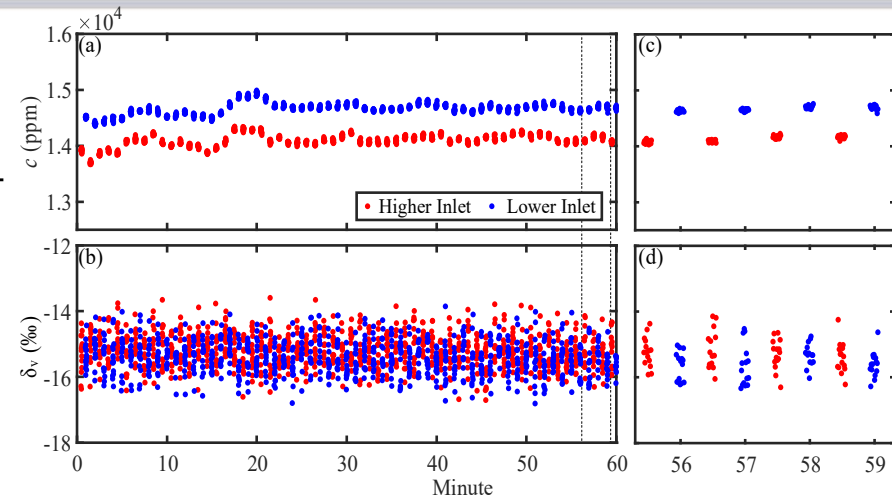
3.1 Keeling曲线法

回归算法:

- (1) 最小二乘回归 (Ordinary Least Squares Regression)
- (2) 几何平均回归 (Geometric Mean Regression)
- (3) York求解模型 (York's solution)

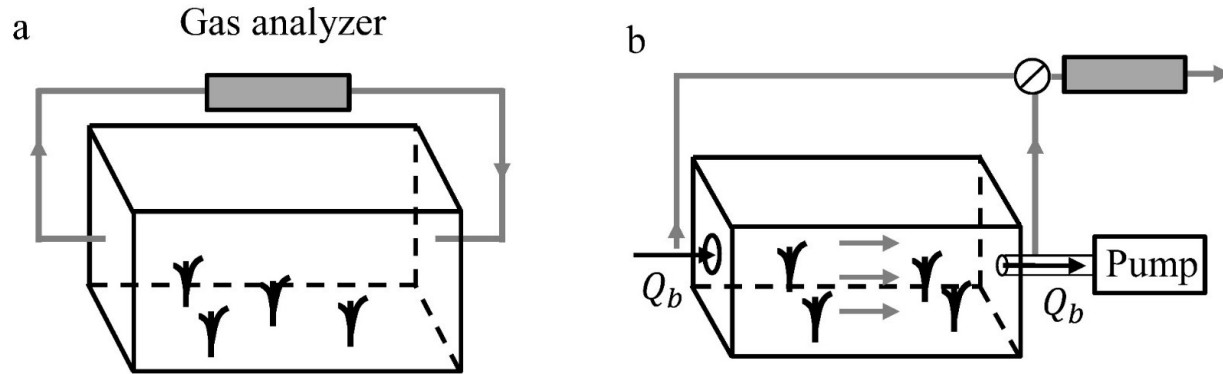
方法挑战

- 大气水汽还受到夹卷过程影响, **两个来源的假设会不成立**
- 在不同高度上**通量源区会不一致**, 特别是混合下垫面



(Hu et al. 2021; Lee et al. 2006; Pataki et al. 2003; Wehr and Saleska 2017)

3.2 箱式法



$$\delta_{out} \chi_{out} = \delta_{in} \chi_{in} + \delta_{ET} \chi_{ET}$$

$$\delta_{out} \chi_{out} u_{out} = \delta_{in} \chi_{in} u_{in} + \delta_{ET} \chi_{ET} (u_{out} - u_{in})$$

$$\delta_{ET} = \frac{\chi_{out} \delta_{out} - \chi_{in} \delta_{in}}{\chi_{out} - \chi_{in}} - \frac{\chi_{in} \chi_{out} (\delta_{out} - \delta_{in})}{\chi_{out} - \chi_{in}}$$



(Yepez et al. 2005; Rothfuss et al. 2021)

3.2 箱式法

观测方法:

箱式法:

(1) 箱体内通入环境大气，观测进气口和出气口水汽混合比及其同位素组分的差异计算 δ_{ET}

(2) 箱体内通入干空气，出气口测量的水汽同位素组分即为 δ_{ET}

在短时间内（约1h）在不同高度观测（Spatial Keeling Plot）

箱式法-Keeling曲线结合法:

在一个闭合回路内，箱体内通入环境大气，观测水汽混合比及其同位素组成，采用Keeling曲线法计算 δ_{ET}

方法挑战:

(1) 箱体内环境要素会变化

(2) 箱体和管路内会有水汽凝结，产生同位素分馏

(3) 需要综合考虑箱体大小和响应时间

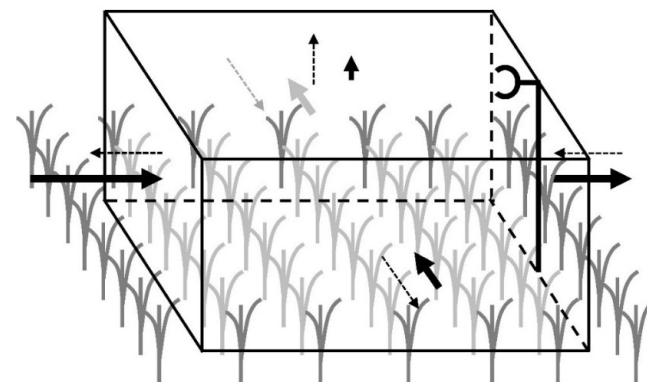
(4) 对操作者要求比较高，野外条件下安装和维护难度较大

(Wang et al. 2013; Dubbert et al. 2013; Dubbert et al. 2014; Wei et al. 2015; Wang et al. 2013; Yopez et al. 2005)

3.3 涡度相关法

控制体积的物质守恒方程

$$NEE = \underbrace{\int_0^z \bar{\rho}_d \frac{\partial \bar{s}_c}{\partial t} dz'}_{\text{I 储存项}} + \underbrace{\bar{\rho}_d \overline{w' s'_c}}_{\text{II 垂直涡度通量项}}$$



广阔、平坦、
均匀下垫面

$$F_{ET} = \frac{\rho_{atm}}{M_{atm}} \overline{\omega' \chi'_{atm}}$$

$$\delta_{ET} = \frac{{}^i F_{ET} / {}^j F_{ET}}{R_{std}} - 1 = \frac{\overline{\omega'^i \chi'_{atm}} / \overline{\omega'^j \chi'_{atm}}}{R_{std}} - 1$$

$$\delta_{ET} = \frac{\overline{\chi_{atm}}}{\overline{\omega' \chi'_{atm}}} \overline{\omega' \delta'_{atm}} + \overline{\delta_{atm}}$$

(Lee 2018; Griffis 2013)

3.3 涡度相关法

基于可调谐二极管激光光谱技术的涡度相关系统

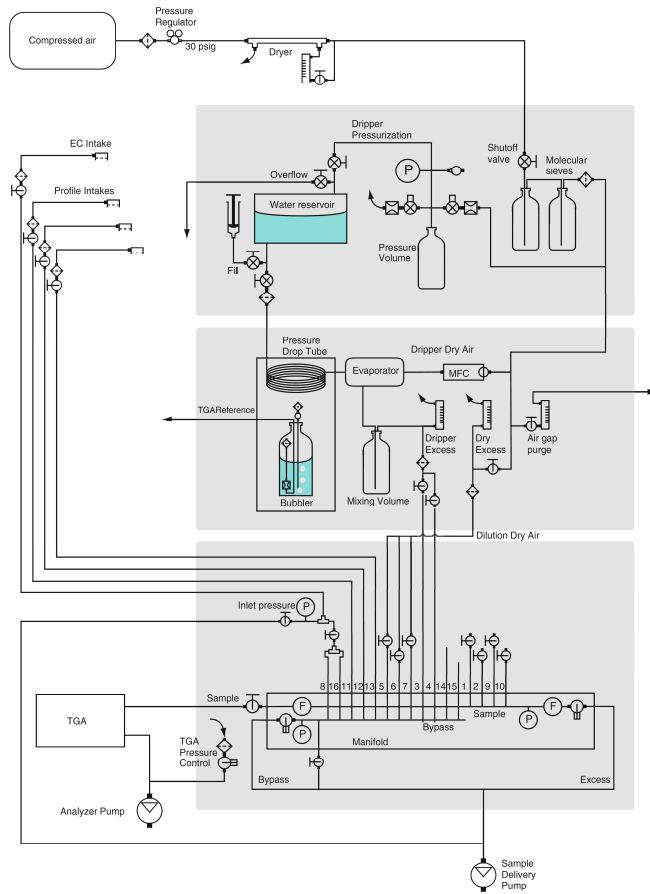


Fig. 1 Diagram of the eddy-covariance and tunable diode laser water vapour sampling system

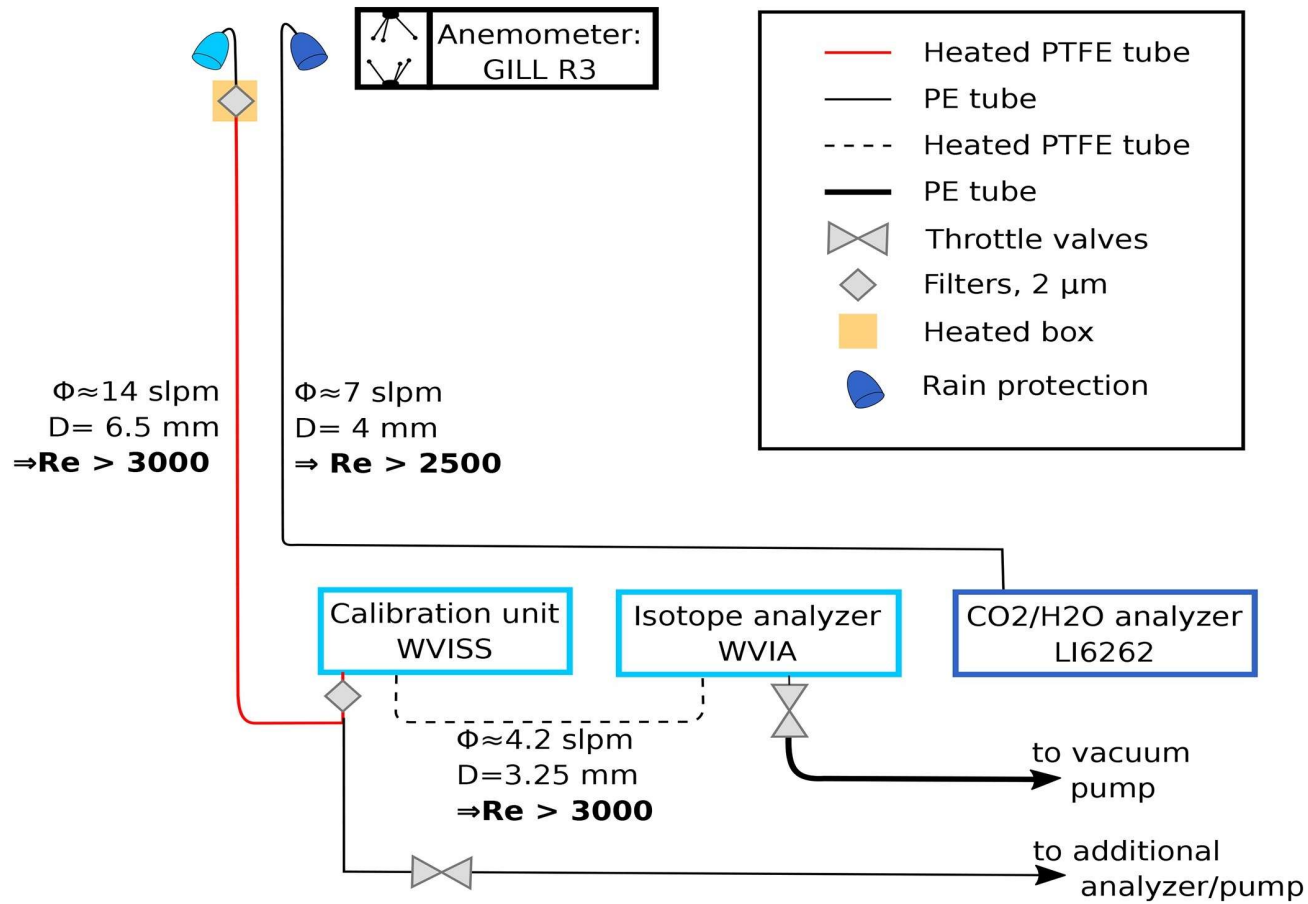


采样频率: 20 Hz

(Griffis 2013)

3.3 涡度相关法

基于离轴积分腔输出光谱技术的涡度相关系统



采样频率: 2 Hz

(Braden-Behrens et al. 2019)

3.3 涡度相关法

优势:

无假设

适用于冠层尺度观测

方法挑战:

- (1) 对仪器观测频率要求较高
- (2) 计算同位素组分和垂直风速脉动过程中会损失一些信息
- (3) 采样管路需加热以避免水汽凝结和高频信号损失
- (4) 用于蒸散观测的研究较少



(Good et al. 2012; Griffis et al. 2008, 2010; Griffis 2013; Sturm et al. 2012)

3.4 通量梯度法

局地一阶闭合假设

- 菲克定律——分子扩散：分子扩散通量与浓度梯度成正比，从高浓度扩散到低浓度。

$$F = -\kappa \frac{\partial c}{\partial z}$$

- 湍流扩散的闭合参数化方案

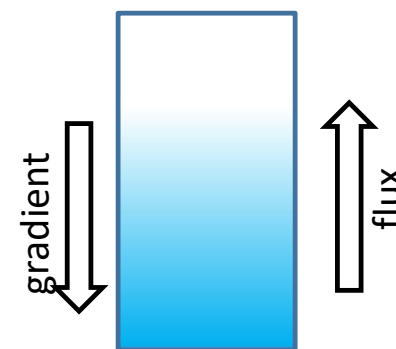
$$\boxed{1} \quad \overline{u'w'} = -K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}$$

$$\boxed{3} \quad \overline{w'\theta'} = -K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}$$

$$\boxed{5} \quad \overline{w's'_c} = -K_c \frac{\partial \bar{s}_c}{\partial z}$$

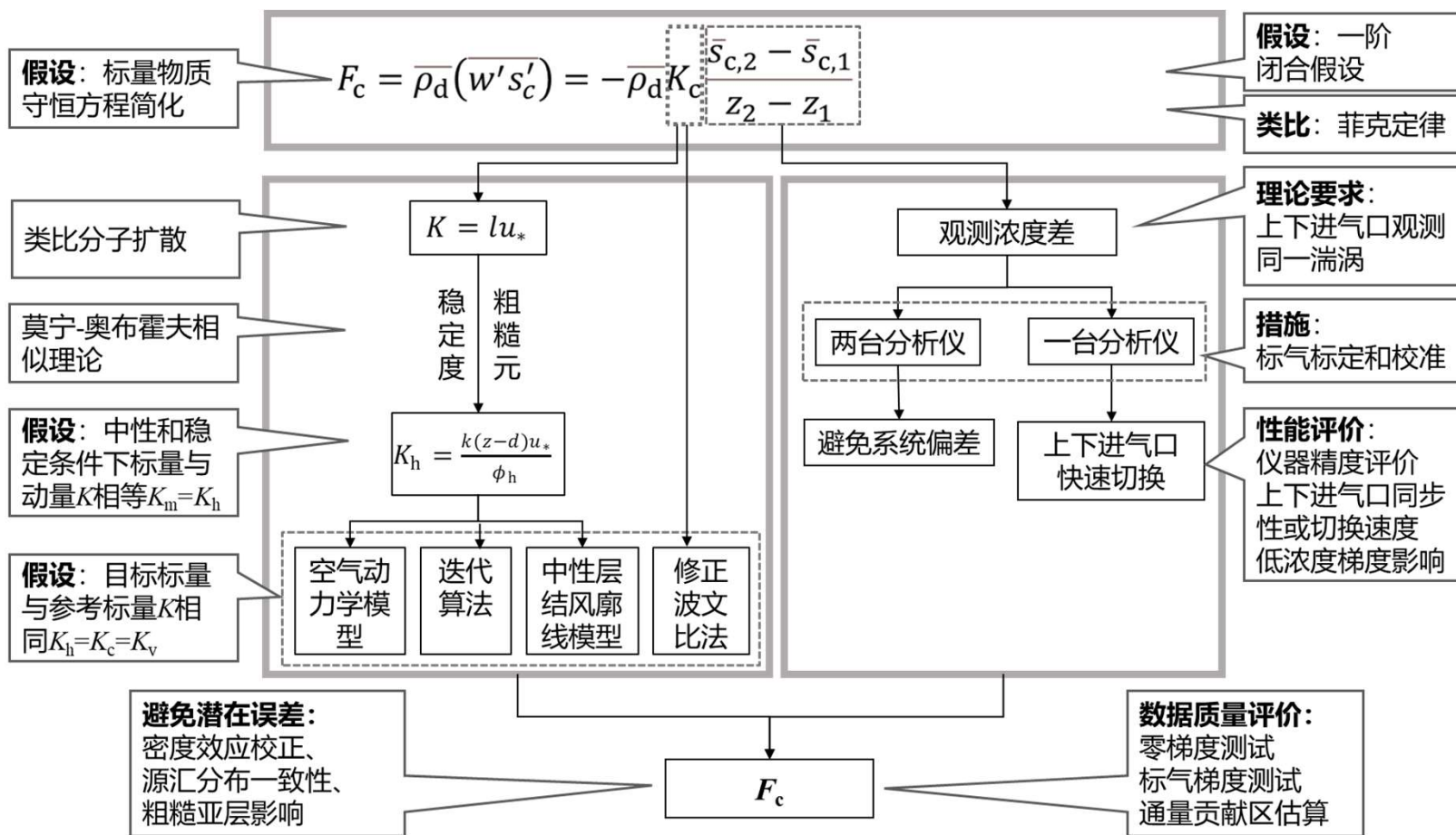
$$\boxed{2} \quad \overline{v'w'} = -K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial z}$$

$$\boxed{4} \quad \overline{w's'_v} = -K_v \frac{\partial \bar{s}_v}{\partial z}$$



3.4 通量梯度法

通量梯度法的基本理论和体系



(肖薇等, 2021)

3.4 通量梯度法

前提假设:

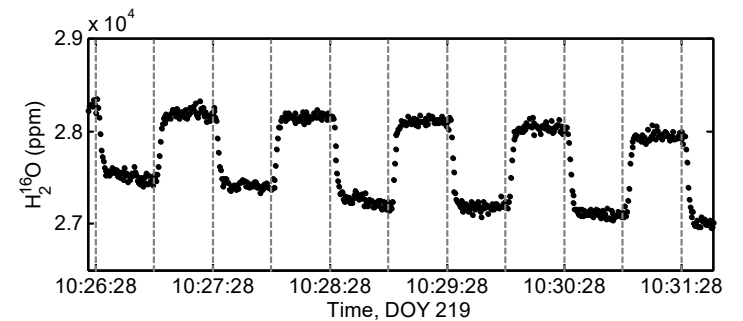
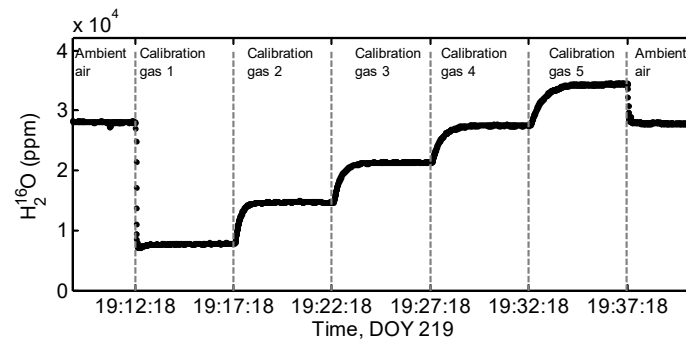
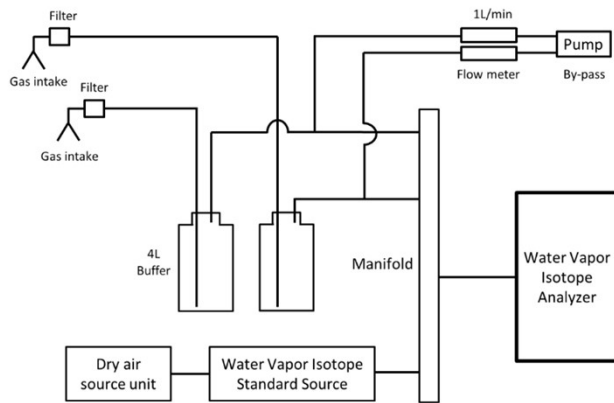
- (1) 大气边界层中 $H_2^{18}O$ 和 $H_2^{16}O$ 分子扩散的效率相同，计算通量比时可以消除扩散系数；
- (2) 上下两个高度有源区一致，且通量贡献区相同。

$$F_{ET} = -\frac{K}{M_V} \frac{\Delta C}{\Delta z}$$

$$F'_{ET} = -\frac{K}{M'_V} \frac{\Delta C'}{\Delta z}$$

$$R_{ET} = \frac{F'_{ET}}{F_{ET}} = \frac{\Delta C'}{\Delta C}$$

$$R_{ET} = \frac{\hat{c}'_{a,2} - \hat{c}'_{a,1}}{\hat{c}_{a,2} - \hat{c}_{a,1}}$$



(Griffis et al. 2005, 2007; Lee et al. 2007; Welp et al. 2008; Xiao et al. 2017)

3.4 通量梯度法

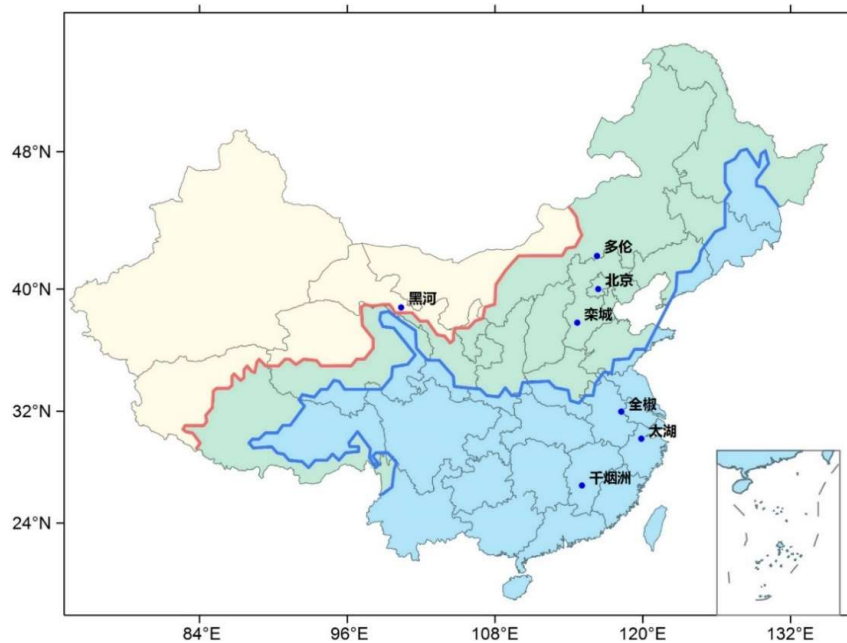
通量梯度法观测冠层尺度 $^{18}\text{O}\text{-H}_2\text{O}$ 通量 (美国明尼苏达州大豆田)



(Welp et al. 2008)

3.4 通量梯度法

中国采用通量梯度法观测蒸散的部分站点



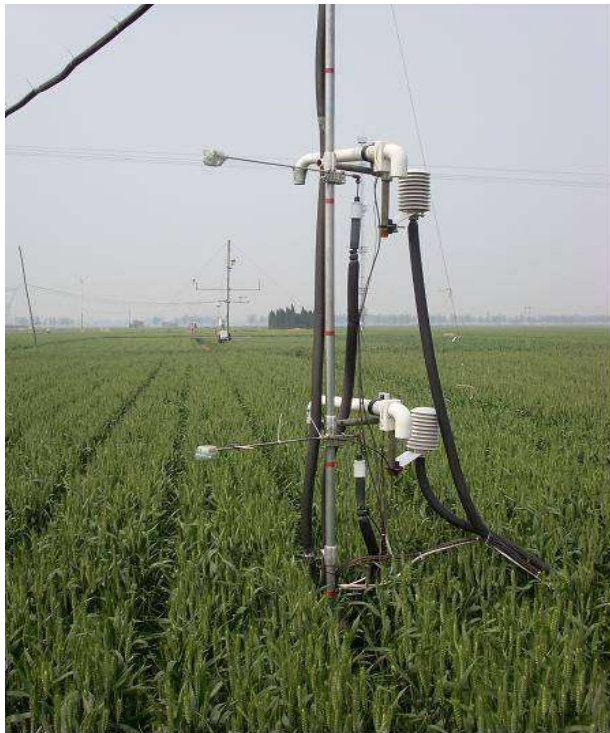
| 气候区 | 地点 | 海拔高度 (m) | 下垫面 | 观测时段 | 观测时长 (月) |
|------|-------|----------|------|--------------------|----------|
| 季风区 | 太湖 | 3 | 湖泊 | 2012.8.4 ~2017.3.1 | 56 |
| | 江西千烟洲 | 102 | 森林 | 2011.7至今 | 116 |
| 过渡带 | 河北栾城 | 50 | 农田 | 2008.4.5~9.13 | 6 |
| | 内蒙古多伦 | 1324 | 草地 | 2009.6.2 ~9.17 | 4 |
| 非季风区 | 甘肃张掖 | 1550 | 绿洲农田 | 2012.5.27 ~9.22 | 5 |

(Huang and Wen 2014; Wen et al. 2011, 2012, 2016; Yang et al. 2015; 肖薇, 2021)

3.4 通量梯度法

ChinaFLUX栾城大气水汽同位素原位采样系统

春小麦



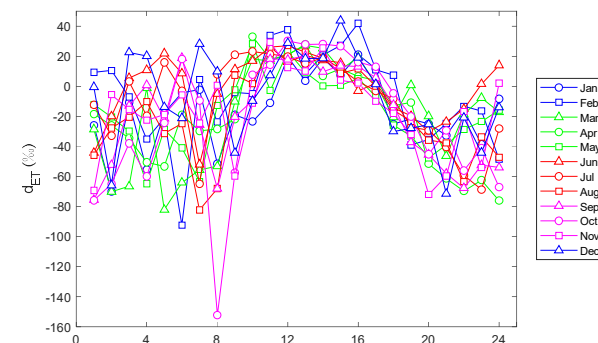
夏玉米



(Wen et al. 2012; Xiao et al. 2012)

3.4 通量梯度法

干烟洲站水汽和通量原位观测系统



(杨斌等, 2015; Xiao et al. In preparation)

目录

CONTENTS



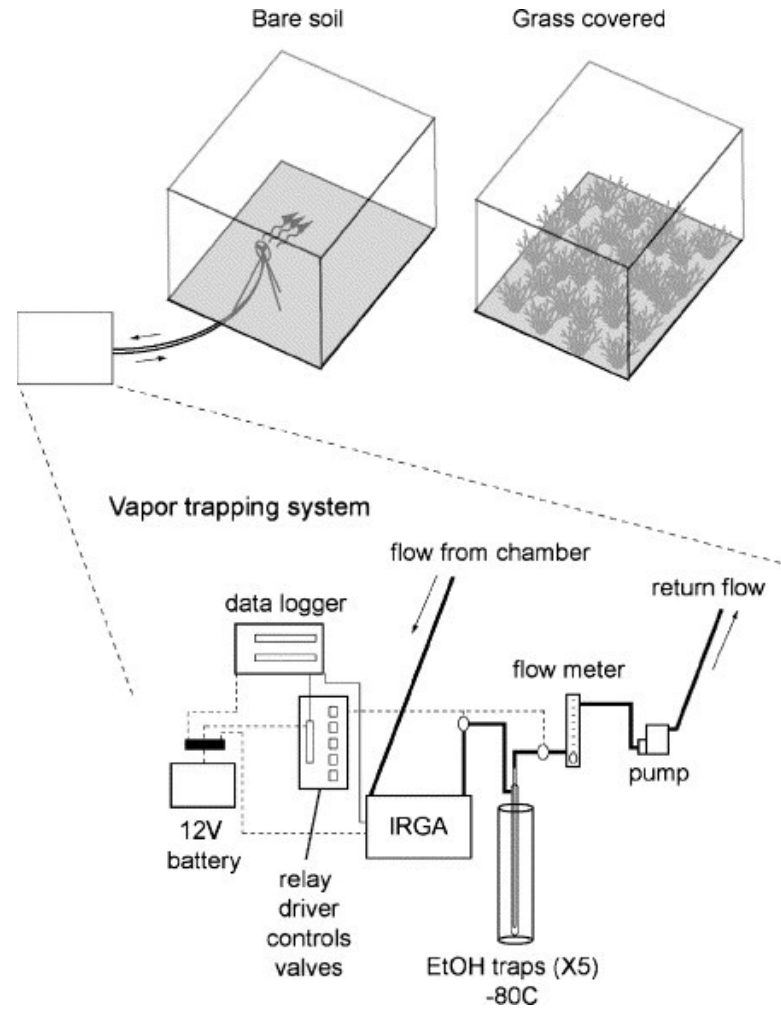
1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
3. 蒸散同位素组分的观测方法
- 4. 蒸发同位素组分的观测和模拟**
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
6. 研究展望



4.1 土壤蒸发同位素组分的观测方法

观测方法:

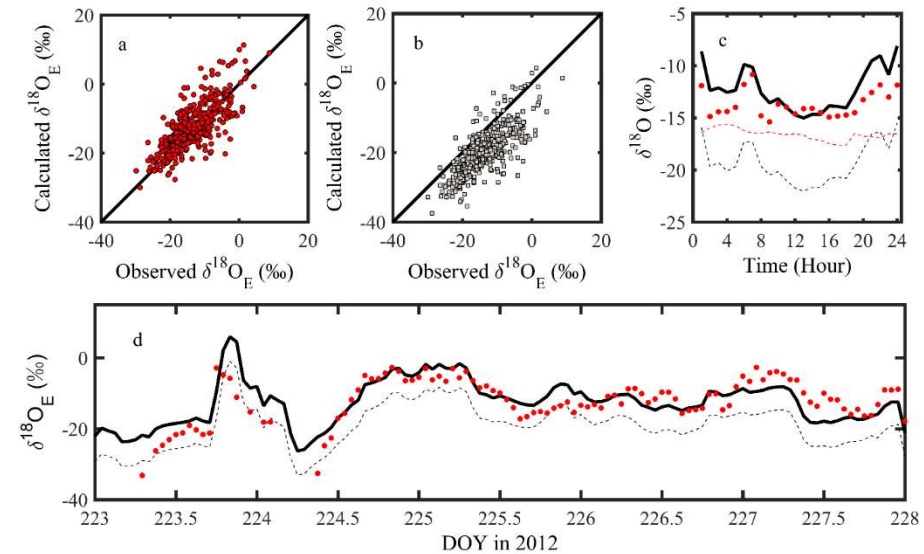
土壤蒸发——箱式法



(Yepez et al. 2005)

4.2 水面蒸发同位素组分的观测方法

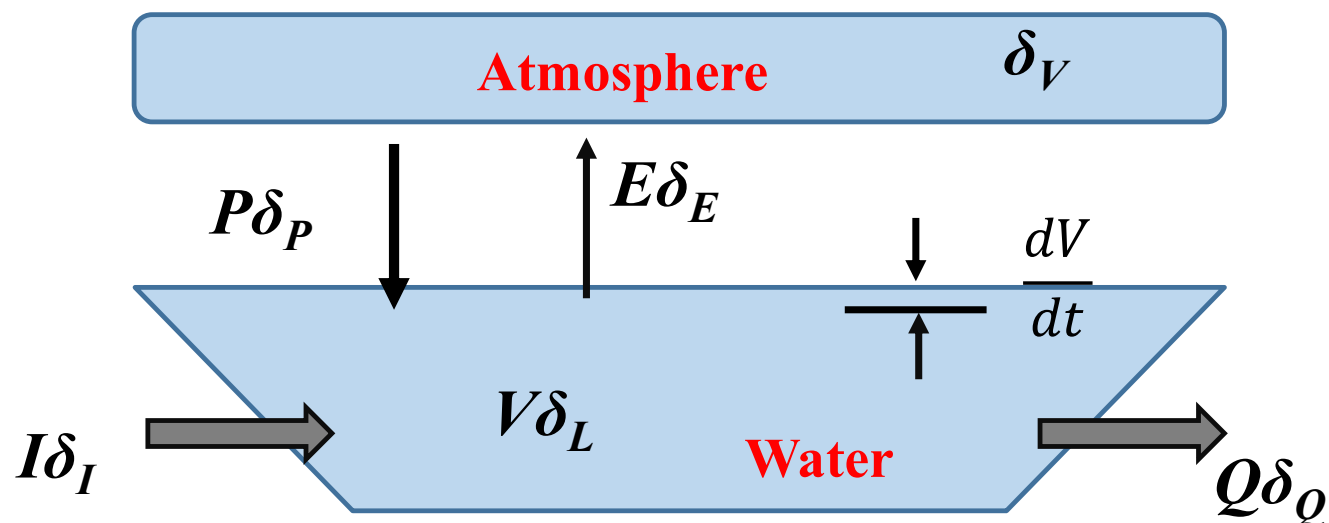
水面 H_2^{18}O 和 HDO 通量：通量梯度法



(Xiao et al. 2017)

4.2 水面蒸发同位素组分的观测方法

水面 H_2^{18}O 和 HDO 通量：稳定同位素质量守恒法



$$I\delta_I + P\delta_P = E\delta_E + Q\delta_Q + \frac{dV\delta_L}{dt}$$

4.3 土壤和水面蒸发同位素组分的模拟方法

Craig-Gordon model

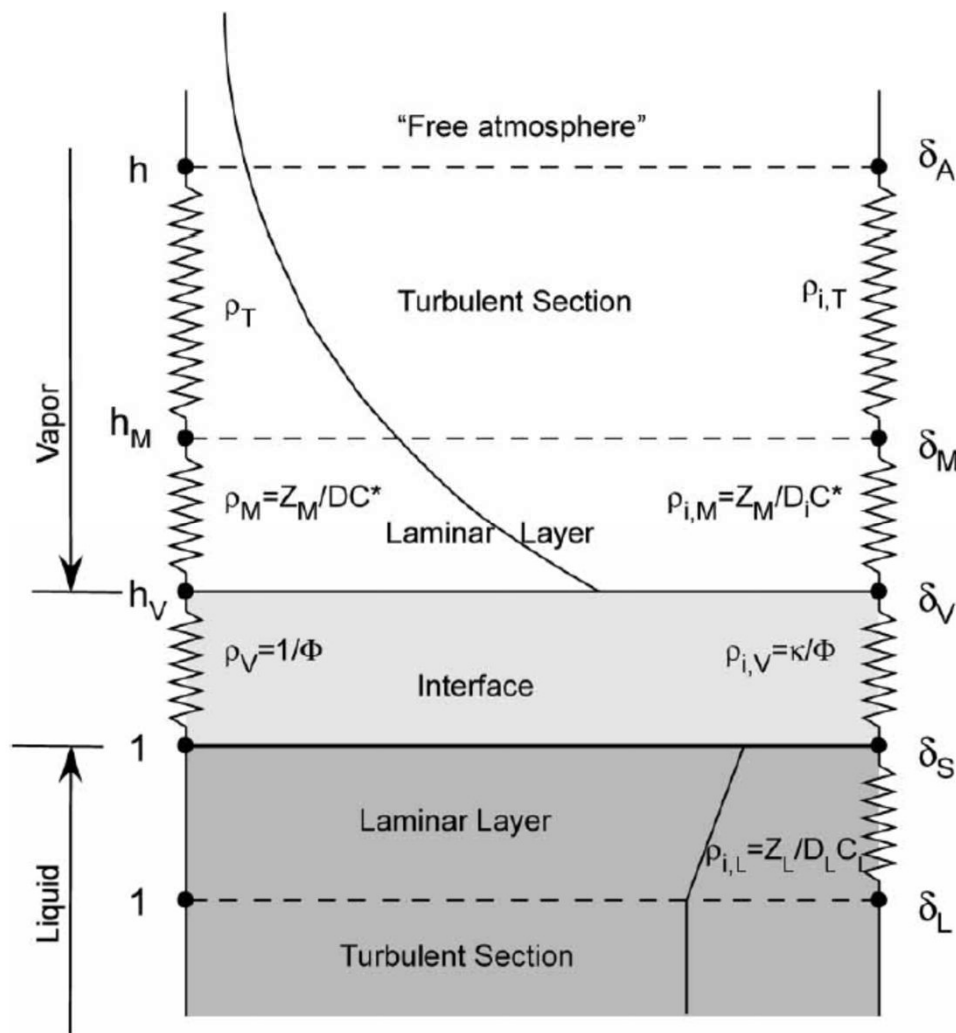
Processes

湍流扩散
Turbulent diffusion

分子扩散
Molecular diffusion

分子扩散
Molecular diffusion

湍流扩散
Turbulent diffusion



Fractionation

动力学分馏
Kinetic fractionation

$$\epsilon_K = n \left(1 - \frac{D_i}{D} \right) \times 10^3$$

effect of air turbulence

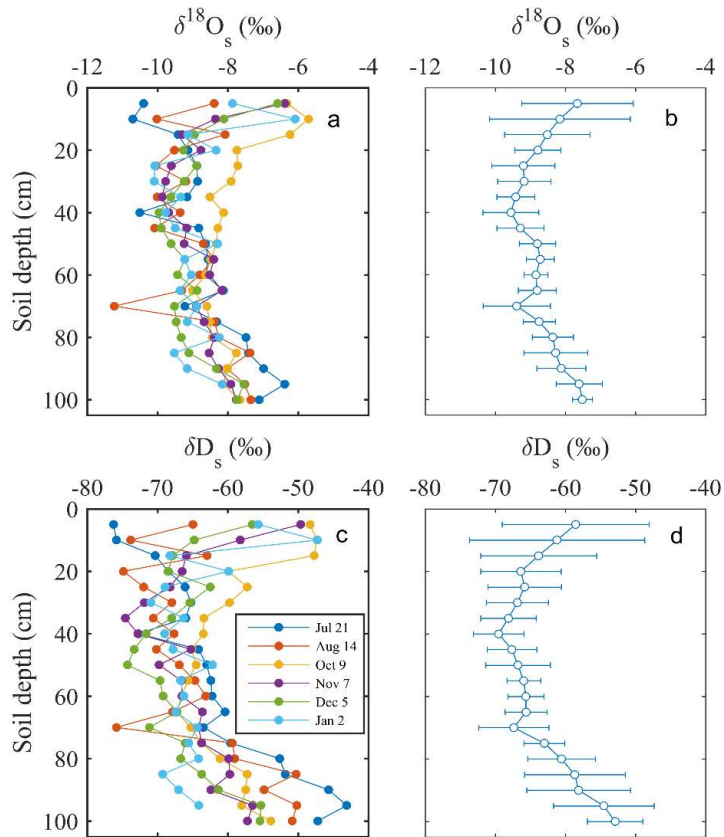
平衡分馏
Equilibrium fractionation

$$\delta_E = \frac{\alpha_{eq}^{-1} \delta_L - h \delta_V - \epsilon_{eq} - (1-h) \epsilon_k}{1-h + 10^{-3} (1-h) \epsilon_k}$$

(Craig & Gordon 1965; Cappa et al. 2003)

4.3 土壤和水面蒸发同位素组分的模拟方法

土壤蒸发同位素组分的模拟，需要注意蒸发界面和动力学分馏系数的确定



$$\alpha_k = D_v / D_v^i \quad \longrightarrow \quad \alpha_k = \left(\frac{D_v}{D_v^i} \right)^n$$

Effects of soil moisture and air turbulence

$$n = \frac{(\theta_{\text{surf}} - \theta_r) n_a + (\theta_{\text{sat}} - \theta_{\text{surf}}) n_s}{(\theta_{\text{sat}} - \theta_r)}$$

(Mathieu and Bariac 1996; Xiao et al. 2018)

目录

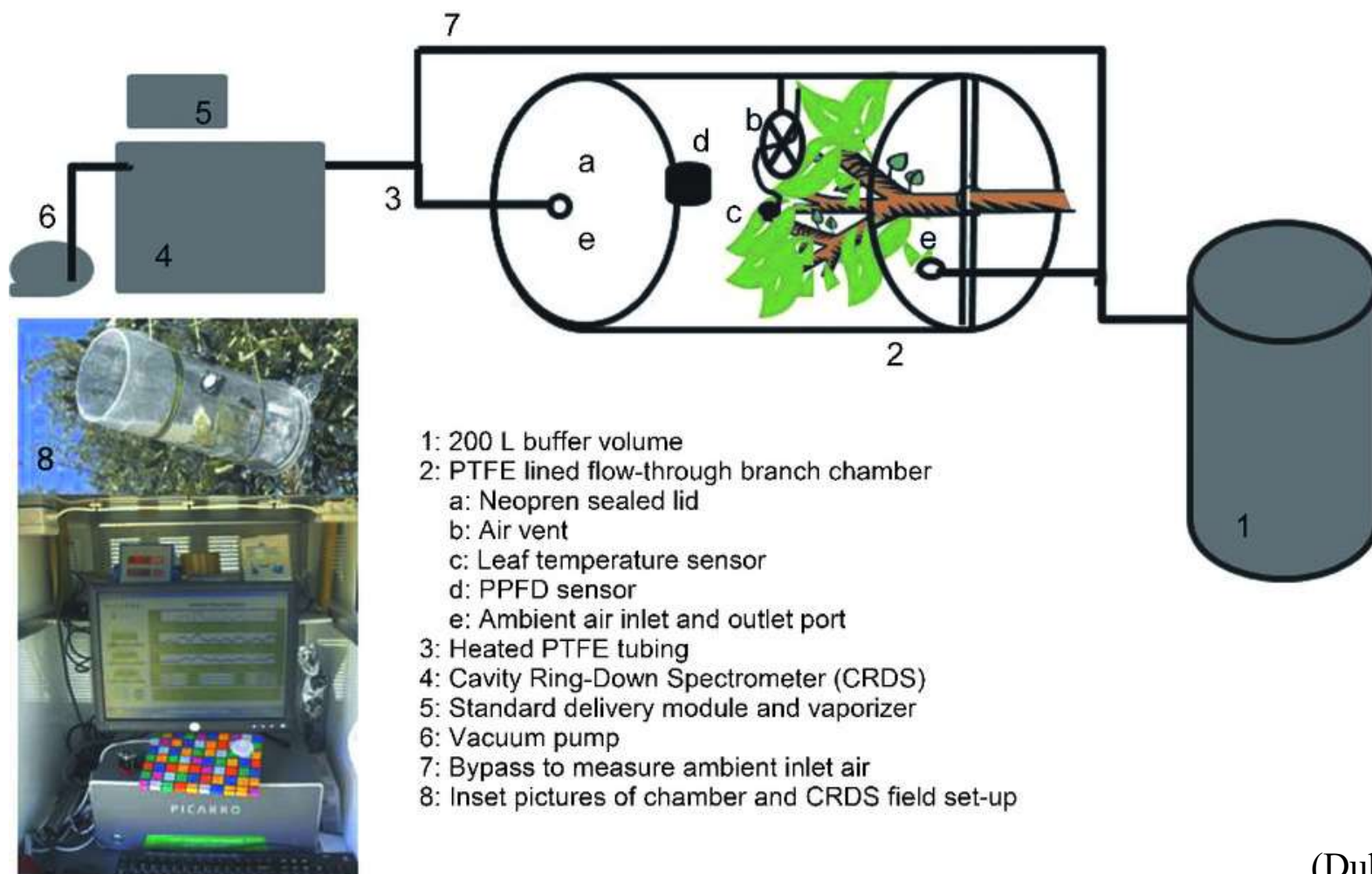
CONTENTS



南京信息工程大学
Nanjing University of Information Science & Technology

1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
3. 蒸散同位素组分的观测方法
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
- 5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟**
6. 研究展望

5.1 蒸腾同位素组分的观测方法



(Dubbert et al. 2014)

5.2 蒸腾同位素组分的模拟方法

The Craig-Gordon model

$$\delta_E = \frac{\alpha_{\text{eq}}^{-1} \delta_L - h \delta_V - \varepsilon_{\text{eq}} - (1-h) \varepsilon_k}{1-h+10^{-3}(1-h) \varepsilon_k}$$

Water mass balance method

$$T = X - \frac{\Delta L_w}{dt}$$

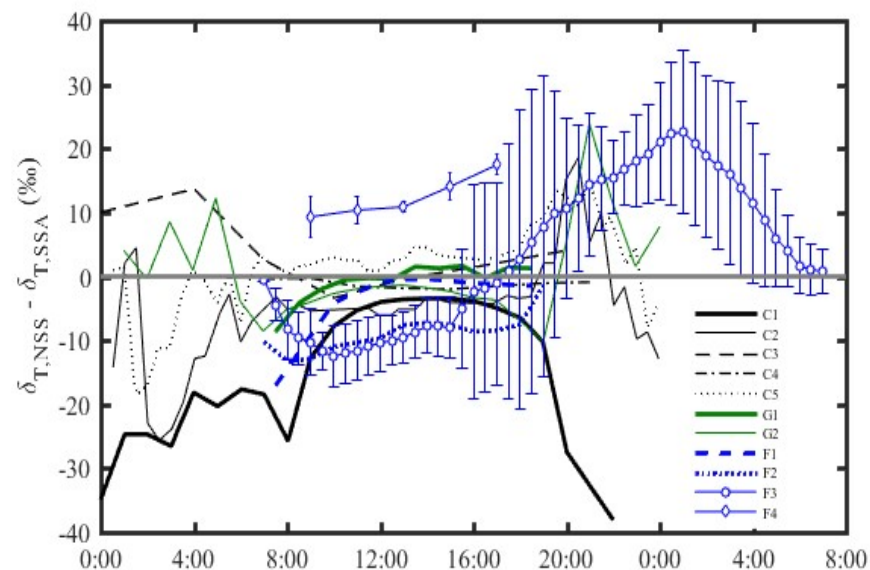
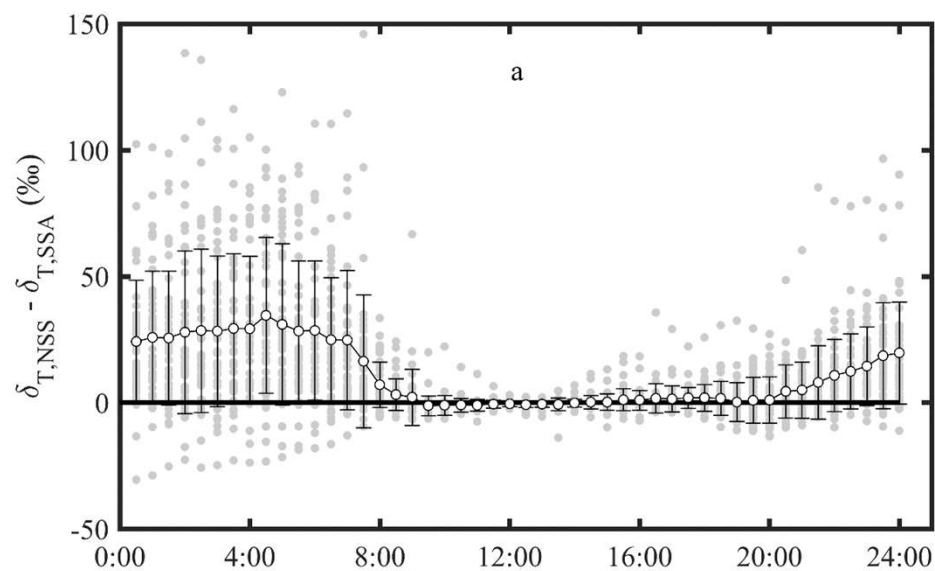
$$\delta_T T = \delta_X X - \Delta(\delta_{L,b} L_w)$$

$$\delta_T = \frac{[\delta_X (T + \Delta L_w) - \Delta(\delta_{L,b} L_w)]}{T}$$

(Xiao et al. 2018)

5.2 蒸腾同位素组分的模拟方法

需要注意非稳态的问题



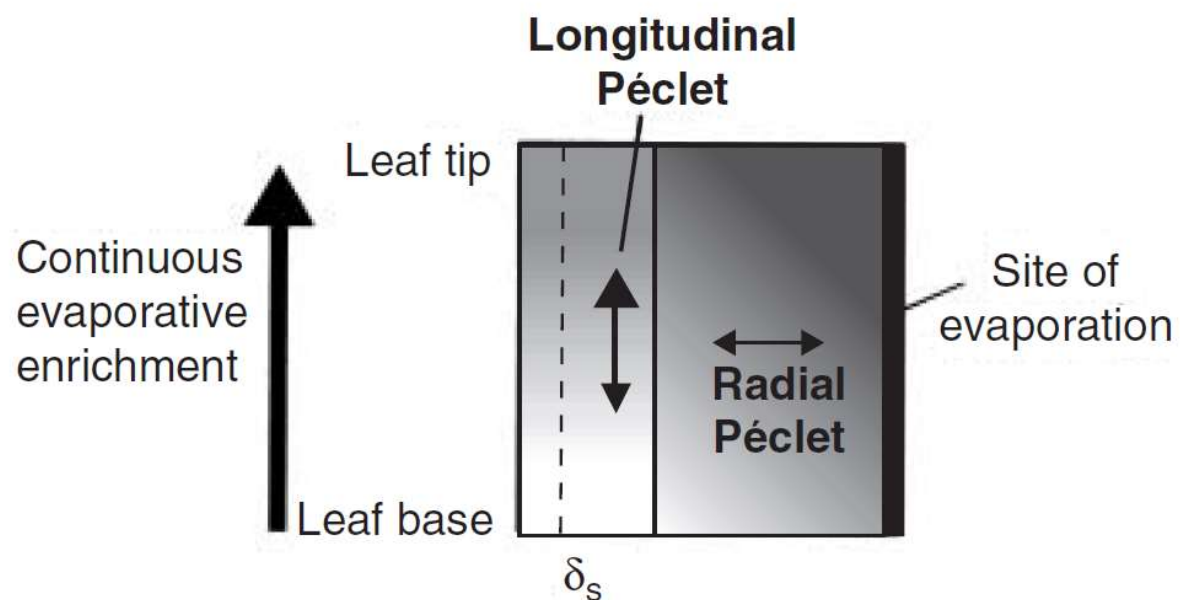
Crops (C1–C5), Grassland (G1–G2), Forest (F1–F4)

(Dubbert et al. 2013, 2014; Hu et al. 2014; ; Lai et al. 2006; Sun et al. 2014; Wang et al. 2015; Welp et al. 2008, Wen et al. 2016, Wu et al. 2017, Xiao et al. 2010, 2018)

5.2 蒸腾同位素组分的模拟方法

需要注意叶片水中同位素组分的分布问题

Péclet效应



(Farquhar and Gan, 2003)

目录

CONTENTS

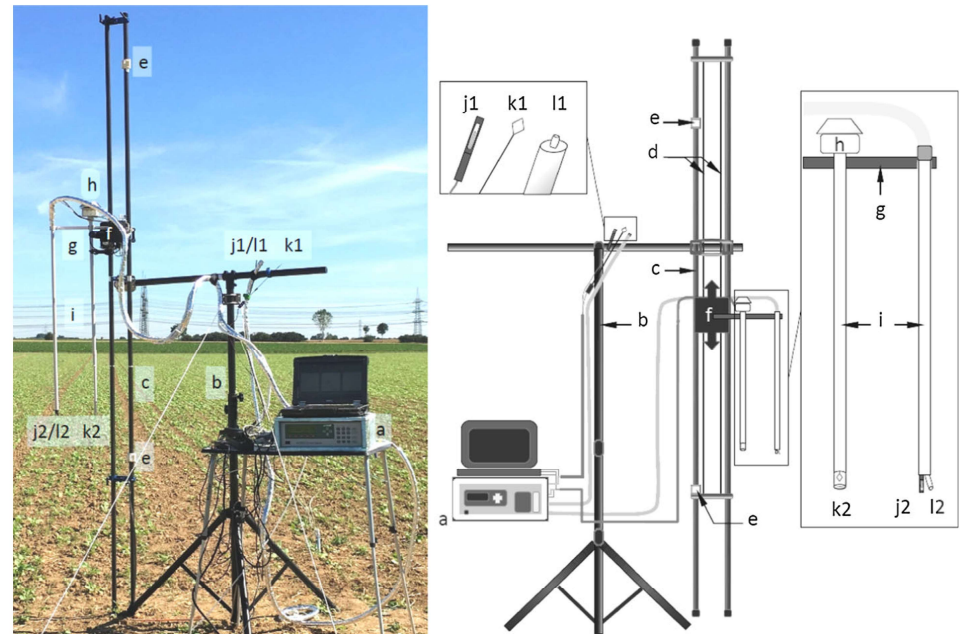
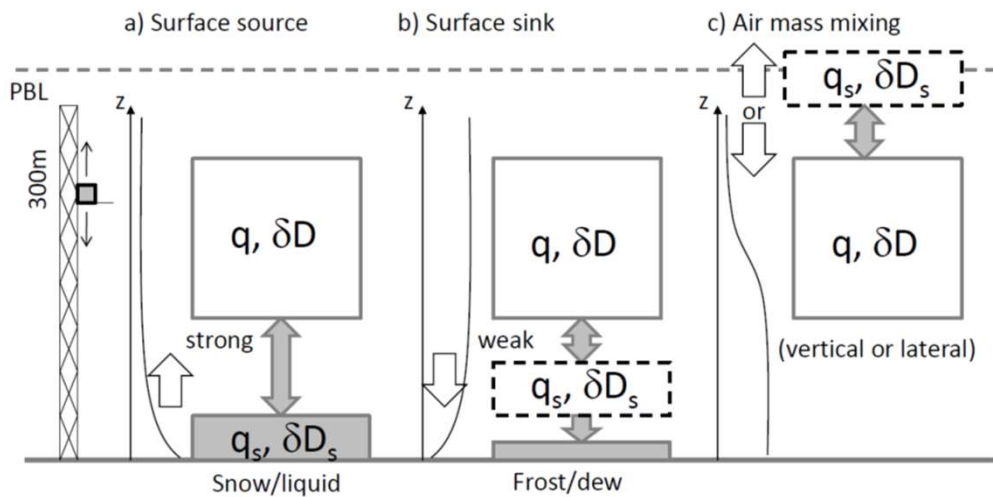


1. 研究背景
2. 水汽同位素的观测方法
3. 蒸散同位素组分的观测方法
4. 蒸发同位素组分的观测和模拟
5. 蒸腾同位素组分的观测和模拟
- 6. 研究展望**

高频、时空连续采样

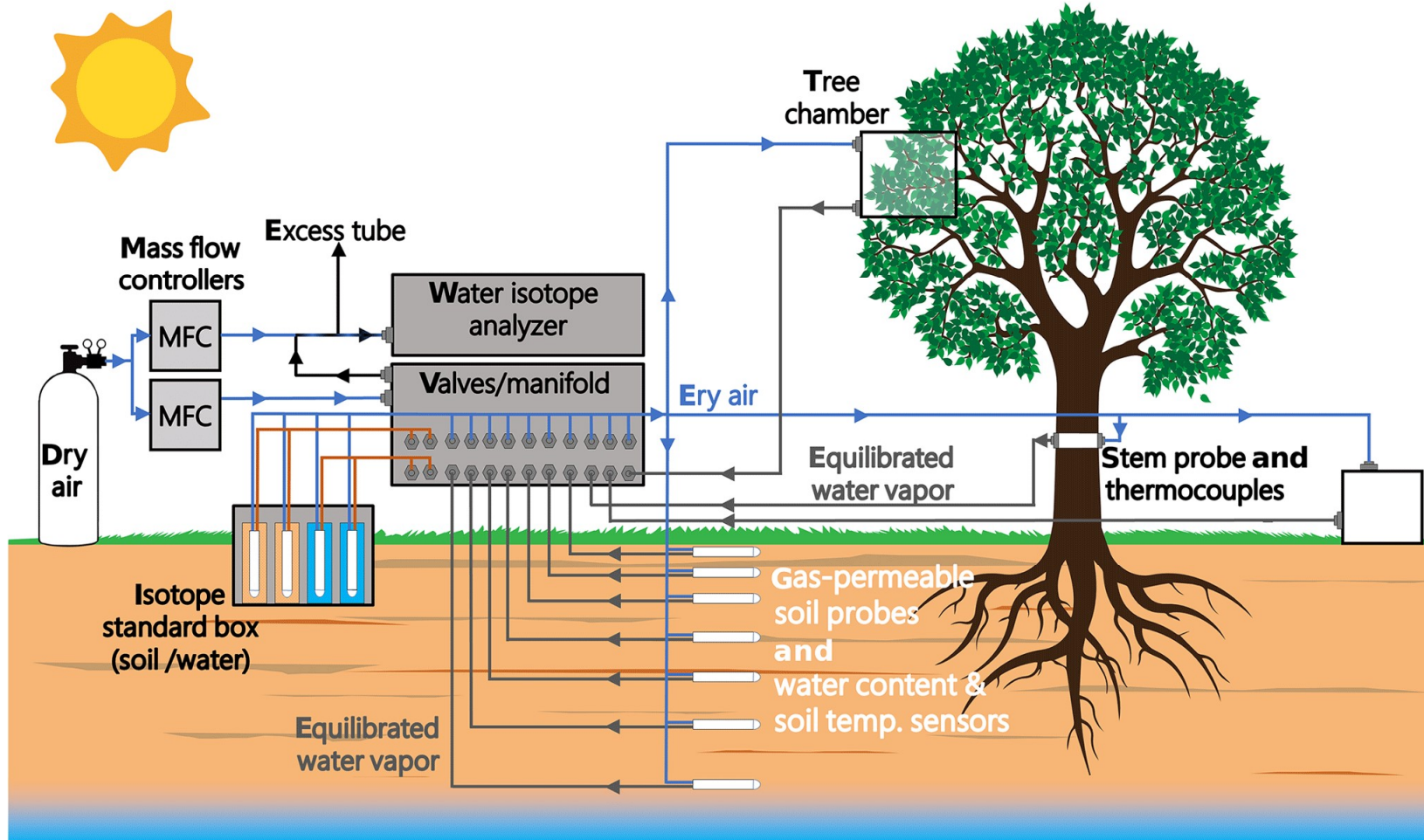
有科学家提出：为满足Keeling曲线法和通量梯度法对高空间梯度的需求，应连续观测大气水汽同位素组分的垂直廓线

挑战：需要高流量、高频率的同位素分析仪，这是一大技术挑战



(Mayer et al., 2009; Noone et al., 2013; Ney and Graf, 2018)

土壤-植被-大气系统同步在线观测



(Beyer et al. 2020)

谢谢，敬请批评指正！

Email: wei.xiao@nuist.edu.cn

<https://yncenter.sites.yale.edu>

