

DOI: 10.5846/stxb201911152458

何维,江飞,居为民.利用大气二氧化碳和羰基硫浓度评估陆地生态系统模型碳通量模拟的不确定性.生态学报,2020,40(13):4371-4382.

He W, Jiang F, Ju W M. Using atmospheric concentrations of carbon dioxide and carbonyl sulfide to assess the uncertainty of carbon fluxes simulated by terrestrial biosphere models. Acta Ecologica Sinica, 2020, 40(13): 4371-4382.

利用大气二氧化碳和羰基硫浓度评估陆地生态系统模型碳通量模拟的不确定性

何 维^{1,2}, 江 飞^{1,2}, 居为民^{1,2,*}

1 南京大学国际地球系统科学研究所, 南京 210023

2 南京大学地理与海洋科学学院, 自然资源部国土卫星遥感应用重点实验室, 江苏省地理信息技术重点实验室, 南京 210023

摘要:生态系统模型是模拟全球陆地生态系统碳循环的重要工具,但是其在全球不同区域的模拟存在很大的不确定性。如何评估陆地生态系统模型的不确定性是一项重要的研究。以北美地区为例,利用 8 个高塔观测站点同步获取的大气 CO₂ 和羰基硫 (OCS) 浓度数据,结合 WRF-STILT 大气粒子扩散模型,评估了 CASA-GFED3、SiB3 和 SiBCASA 三种陆地生态系统模型模拟总初级生产力 (GPP) 和净生态系统 CO₂ 交换 (NEE) 通量的不确定性。结果表明, SiB3 模型能很好地模拟北美陆地生态系统 GPP 和 NEE 的季节变化时相和幅度,在 3 种模型中具有最佳的模拟能力; CASA-GFED3 模型模拟的 NEE 季节变化较为理想,但对生长季 GPP 的模拟存在较大的误差, SiBCASA 模型在模拟冬季晚期和春季早期的 NEE 和 GPP 时表现较不理想。研究证明了大气 CO₂ 和 OCS 在评估陆地生态系统模型碳通量模拟的不确定性中的作用,为利用大气 CO₂ 和 OCS 观测数据优化计算陆地生态系统光合和呼吸碳通量提供了理论支撑。

关键词:二氧化碳;羰基硫;生态系统模型;碳通量;WRF-STILT 模型;北美

Using atmospheric concentrations of carbon dioxide and carbonyl sulfide to assess the uncertainty of carbon fluxes simulated by terrestrial biosphere models

HE Wei^{1,2}, JIANG Fei^{1,2}, JU Weimin^{1,2,*}

1 International Institute for Earth System Science, Nanjing University, Nanjing 210023, China

2 Jiangsu Provincial Key Laboratory of Geographic Information Science and Technology, Key Laboratory for Land Satellite Remote Sensing Applications of Ministry of Natural Resources, School of Geography and Ocean Science, Nanjing University, Nanjing 210023, China

Abstract: Terrestrial Biosphere Models (TBMs) are important tools to simulate the carbon cycle of global terrestrial ecosystem, but there are still large uncertainties in their simulation in different regions over the globe. How to evaluate the uncertainty of TBMs is a critical research issue. In this study, taking North America as study area, the uncertainty of gross primary production (GPP) and net ecosystem exchange of CO₂ (NEE) fluxes simulated by CASA-GFED3, SiB3 and SiBCASA was evaluated by using atmospheric concentration data of CO₂ and carbonyl sulfide (OCS) simultaneously obtained from 8 high tower observational stations and WRF-STILT atmospheric particle diffusion model. The results show that the SiB3 model can well simulate the seasonal changes of GPP and NEE in terrestrial ecosystem, and has the best simulation ability among the three models; the CASA-GFED3 model can simulate the seasonal changes of NEE, but there is a large error in the simulation of GPP in growing season; and the SiBCASA model is not able to reasonably simulate NEE and GPP in late winter and early spring. This study proved the role of atmospheric CO₂ and OCS in evaluating the

基金项目:国家重点研发计划(2016YFA0600204);国家自然科学基金项目(41907378)

收稿日期:2019-11-15; 修订日期:2020-05-27

* 通讯作者 Corresponding author. E-mail: juweimin@nju.edu.cn

uncertainty of carbon fluxes simulated by TBMs, and provided theoretical support for optimizing the estimation of photosynthetic and respiratory carbon flux of terrestrial ecosystem by using the observation data of atmospheric CO₂ and OCS.

Key Words: carbon dioxide; carbonyl sulfide; terrestrial biosphere model; carbon flux; WRF-STILT model; North America

认识陆地生态系统碳循环是全球变化研究的重要前提。生态系统模型是模拟全球生态系统碳循环的重要工具,但是模型模拟仍存在很大的不确定性,包括季节变化、年际变化和空间分布等方面。生态系统模型的不确定性主要源于模型的结构、对环境胁迫的响应及反馈的刻画、参数取值和输入数据的误差等。

评价陆地生态系统模型的不确定性是一项十分重要的研究,是准确评估当前陆地碳循环状态与与预测未来变化的前提。利用观测数据来评价模型是常用的方法。用于评价碳循环模型的数据包括站点尺度涡度通量、大气 CO₂ 浓度、叶绿素荧光和生物量等。Messerschmidt 等^[1], Fang 等^[2] 和 Frankenberg 等^[3] 分别利用地面遥感、高塔和飞机观测的大气 CO₂ 数据评价了基于生态系统模型和遥感的碳通量模拟。Peng 等^[4] 利用涡度通量、站点和卫星 CO₂ 浓度等多种数据系统评价了生态系统模型的碳通量模拟。Byrne 等^[5] 利用卫星植被叶绿素荧光与 CO₂ 柱浓度数据评价了北美中纬度地区生态系统光合和呼吸碳通量估算。

由于陆地生态系统是重要的碳汇,且具有显著的季节变化,强烈地改变着大气 CO₂ 的浓度。大气 CO₂ 浓度可以反映陆地生态系统与大气之间的碳交换信息。通过与基于生态系统模型模拟碳通量的浓度贡献比较,可以评估生态系统模型的不确定性^[4-5]。但是,大气 CO₂ 浓度虽然能为陆地生态系统碳通量的估算提供区域及以上的大尺度约束信息,但它仅能反映陆地和大气之间的净交换通量,无法分别反映光合和呼吸两个关键的碳通量分量,只有提供独立的约束信息才能分离这两个分量。近年来,羰基硫(OCS)被认为能够有效示踪光合作用,基于这一发现,通过联合 OCS 和 CO₂,可以实现 GPP 和 Reco 分离^[6],为区域尺度 GPP 估算提供了一个重要方法^[7-8]。

OCS 是大气中最丰富的一种含硫气体,生命周期为 2—4a,在大气中的平均浓度为 500 pmol/mol^[9]。OCS 的源主要包括海洋释放(含 OCS 释放和 CS₂、DMS 的分解),人类活动释放(含 OCS 释放和 CS₂、DMS 的分解)和生物燃烧,以及少量的无氧土壤的释放。OCS 的汇主要包括植被和土壤吸收,以及平流层 OH 作用消耗^[10]。OCS 在陆地生态系统的过程主要包括植被光合吸收与土壤有氧吸收和无氧释放^[11]。OCS 的植被吸收主要受碳酸酐酶(Carbonic Anhydrase, CA)活性、气孔导度、辐射、温度和水分含量的影响。

OCS 和 CO₂ 的植被吸收在叶片尺度和生态系统尺度上存在如下关系^[9]:

$$F_{\text{ocs}} = \text{GPP} \times \text{LRU} \times \frac{[\text{OCS}]}{[\text{CO}_2]} \quad (1)$$

式中, F_{ocs} 表示 OCS 植被吸收通量, LRU (Leaf Relative Uptake) 表示叶片对 OCS 和 CO₂ 的吸收速率之比, $[\text{OCS}]/[\text{CO}_2]$ 表示 OCS 和 CO₂ 的环境浓度之比。上述关系是从 OCS 信号推算 GPP 的理论基础。

利用大气 OCS 示踪 GPP 的研究,目前仍处于起步阶段。Campbell 等^[12] 利用飞机测量的 OCS 大气浓度数据和 GPP 比例模型估算了北美生长季 GPP。Asaf 等^[13] 在生态系统尺度上,利用 OCS 通量和大气浓度估算 GPP,并指出大气 OCS 通量观测可以用来约束 GPP。Launois 等^[14] 在全球尺度上利用 OCS 大气同化和 GPP 尺度模型估算 GPP。现有的研究指明,联合大气 OCS 和 CO₂ 观测可以分别优化 GPP 和 Reco 通量。Hilton 等^[7] 利用机载 OCS 数据和大气传输模型评价了几种生态过程模型模拟美国生长季峰期 GPP 空间分布的合理性。

针对大气 OCS 和 CO₂ 数据在生态系统碳通量评价中的作用和研究不足,本研究利用在北美地区 8 个高塔站点同步观测的大气 CO₂ 和 OCS 浓度数据,结合 WRF-STILT 大气输送模型,评估 CASA-GFED3、SiB3 和 SiBCASA 三种陆地生态系统模型模拟 GPP 和 NEE 通量的不确定性。

1 数据与方法

1.1 大气 CO₂ 与 OCS 浓度数据

大气浓度数据来源于美国 NOAA-ESRL 的全球温室气体观测网 (Global Greenhouse Gas Reference Network)^[15-16]。气体样本被自动收集到可编程式罐装样本系统 (Programmable Flask Packages, PFPs)。在北美共有 8 个高塔站点和 32 个飞机站点,其分布情况以及下垫面植被类型如图 1 所示,高塔站点的详细信息见表 1。高塔站点的采样频率为每天一次或隔天一次。考虑大气信号的稳定性,本研究只使用了当地时 10:00—18:00 之间高塔采集的数据。

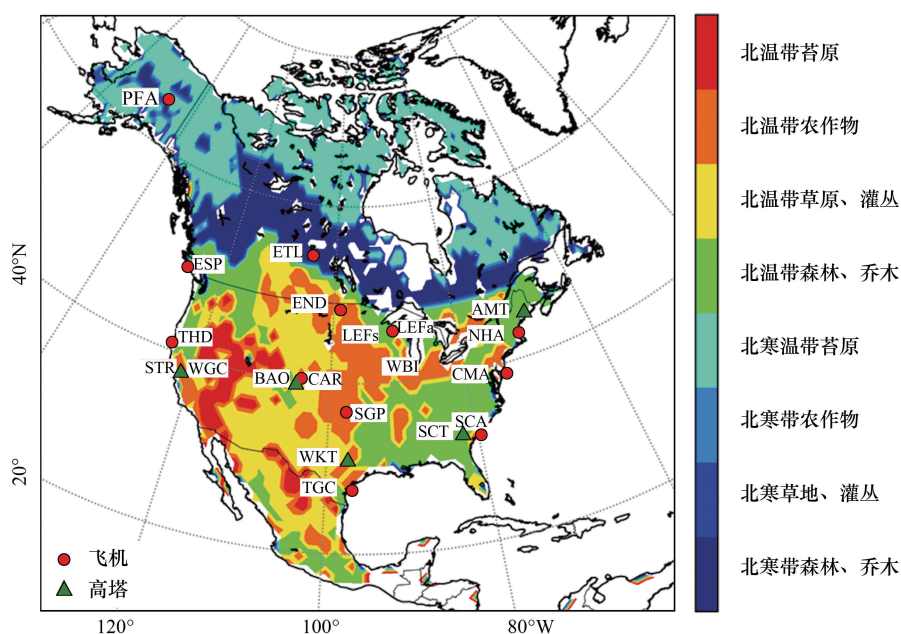


图 1 北美地区 CO₂ 和 OCS 的高塔和飞机大气观测站点分布及地表覆盖类型

Fig.1 Sites at which CO₂ and OCS observations were used and land cover types in North America

高塔站点: AMT (Argyle, Maine, United States), BAO (Erie, Colorado, United States), LEFs (Park Falls, Wisconsin, United States), SCT (Beech Island, South Carolina, United States), STR (Sutro Tower, San Francisco, California, United States), WBI (West Branch, Iowa, United States), WGC (Walnut Grove, California, United States), WKT (Moody, Texas, United States);

飞机站点: CAR (Briggsdale, Colorado, United States), CMA (Cape May, New Jersey, United States), DND (Dahlen, North Dakota, United States), ESP (Estevan Point, British Columbia, Canada), ETL (East Trout Lake, Saskatchewan, Canada), LEFa (Park Falls, Wisconsin, United States), NHA (Worcester, Massachusetts, United States), PFA (Poker Flat, Alaska, United States), SCA (Charleston, South Carolina, United States), SGP (Southern Great Plains, Oklahoma, United States), TGC (Sinton, Texas, United States), THD (Trinidad Head, California, United States)

1.2 大气浓度模拟

1.2.1 WRF-STILT 模型

大气传输模型可以建立观测的大气浓度与地表通量之间的关联,本文选择 STILT 模型作为大气输送模型。STILT 模型是一种用于描述大气输送过程的四维拉格朗日粒子扩散模型。该模型最初开发用于模拟观测接收点的上层气流影响范围,也可以用于量化气体的源^[17]。本文采用 WRF 气象场来驱动 STILT 大气输送模型^[18]。

STILT 模型的表达式为:

$$C(x_r, t_r) = \sum_{i,j,m} f(x_r, t_r | x_i, y_i, t_m) \cdot F(x_i, y_i, t_m) + \sum_{i,j,k} I(x_r, t_r | x_i, y_i, z_k, t_0) \cdot C(x_i, y_i, z_k, t_0) \quad (2)$$

表 1 本文所使用的北美地区 CO₂和 OCS 的高塔观测站点信息

Table 1 Information on tall tower observations of CO ₂ and OCS used in this study over North America				
站点名称 Site name	站点类型 Site type	地点 Location	纬度, 经度, 高程 Latitude, longitude, elevation	观测起始时间 Observation period
AMT	高塔	Argyle, Maine, US	45° 2'N, 68°41'W, 53 masl	2008-11-23 到 2012-08-14
BAO	高塔	Erie, Colorado, US	40° 3'N, 105° 0'W, 1584 masl	2007-08-16 到 2012-08-20
LEFs	高塔	Park Falls, Wisconsin, US	45°57'N, 90°16'W, 472 masl	2002-08-24 到 2012-08-22
SCT	高塔	Beech Island, South Carolina, US	33°24'N, 81°50'W, 115 masl	2008-08-14 到 2012-08-16
STR	高塔	Sutro Tower, San Francisco, California, US	37°45'N, 122°27'W, 254 masl	2007-10-02 到 2012-08-19
WBI	高塔	West Branch, Iowa, US	41°43'N, 91°21'W, 241 masl	2004-09-14 到 2012-08-12
WGC	高塔	Walnut Grove, California, US	38°16'N, 121°29'W, 0 masl	2007-09-21 到 2012-08-16
WKT	高塔	Moody, Texas, US	31°19'N, 97°20'W, 251 masl	2006-07-07 到 2012-08-14

$$f(X_r, t_r | x_i, y_j, t_m) = \frac{m_{air}}{h \bar{\rho}(x_i, y_j, t_m)} \frac{1}{N_{tot}} \sum_{p=1}^{N_{tot}} \cdot t_{p,i,i,k} \tag{3}$$

$$I(X_r, t_r | X, t) = \frac{\rho(X_r, t_r | X, t)}{N_{tot}} = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{p=1}^{N_{tot}} \delta(X_p(t) - X) \tag{4}$$

式中, C 表示模拟浓度, X_r 表示观测点的位置向量, t_r 表示观测时间。公式(2)第一部分表示垂直对流源/汇的贡献,第二部分表示水平对流和上层气流的贡献。公式(3)计算大气垂直对流的影响足迹 f 。公式(4)计算浓度的水平对流和上层气流输送强度 I 。

WRF-STILT 模型的最重要输入是垂直和水平风场廓线,其他输入数据包括温度廓线、气压、湿度、地表粗糙度、地表潜热通量、感热通量和摩擦速度等。边界层高度可以在 STILT 模型内部计算,也可以来源于气象模型输入。基于 WRF-STILT 模型,对各大气组分进行输送模拟,汇聚得到四维时空的模拟大气浓度(图 2)。

1.2.2 CO₂浓度模拟

在特定区域,大气 CO₂浓度由地表通量引起的浓度变化和侧边界条件两部分构成。地表通量的变化主要受到植被光合吸收和呼吸释放、海洋吸收和释放、化石燃料排放和野火释放等地表碳通量的影响^[19]。植被光合吸收(GPP)和呼吸释放(Reco)通量可由陆地生态系统模型模拟,其他通量可以通过模型模拟或者调查数据获取。

陆地生态系统碳通量采用了 CASA-GFED3^[20]、SiB3^[21]和 SiBCASA^[22-23]3 个模型的模拟结果,时间分辨率为 3h,空间分辨率为 1°×1°。除了陆地生态系统碳通量外,还包括海洋、化石燃料排放和野火排放碳通量,本文从 CarbonTracker CT2013B(<https://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/carbontracker/CT2013B/>)产品中直接获取这些数据。CT2013B 海洋通量和陆地生态系统碳通量一起被优化,这里采用优化后的海洋通量。CT2013B 使用两种海洋通量数据集、两种化石燃料排放数据集和一种野火排放碳通量数据,发布的产品结果为采用不同输入通量组合的优化结果集合平均值、未优化通量则等同于原有数据集的平均值,具体信息见表 2。

侧边界条件一般根据大气测量或者从已有模型模拟的浓度场确定。本文根据全球模型模拟的浓度场(CT2013B 优化的 CO₂浓度场)和测量数据(OCS 在北美海洋边界的飞机廓线)确定侧边界条件。

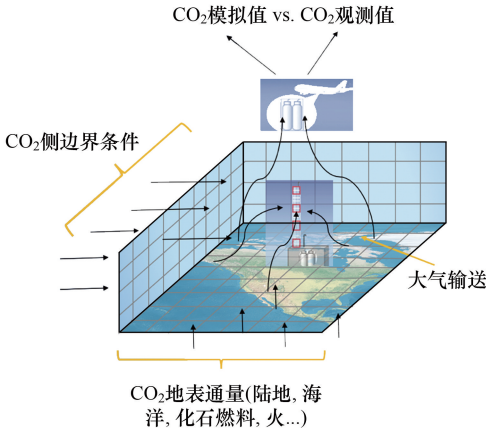


图 2 基于 WRF-STILT 模型的 CO₂区域大气输送过程与浓度模拟示意图
Fig.2 Diagram describing the processes of regional atmospheric transport and concentration simulations based on the WRF-STILT model

表 2 使用的 CO₂ 通量数据信息
Table 2 Specific information of the CO₂ fluxes involved in the atmosphere-biosphere exchange

组分通量 Component flux	时间分辨率 Temporal resolution	数据来源 Data source
陆地光合和呼吸 Terrestrial photosynthesis and respiration	3h	SiB3, SiBCASA, 或 CASA-GFED3
海洋 Ocean	插值为 3h	CT2013B
化石燃料 Fossil fuel	插值为 3h	CT2013B
野火 Fire	插值为 3h	CT2013B

1.2.3 OCS 浓度模拟

模拟大气 OCS 浓度的主要组分通量,包括植被吸收通量和土壤通量的陆地生态系统部分,以及人为活动、海洋、生物燃烧和平流层 OH 作用消耗等非陆地生态系统部分。

植被 OCS 吸收通量根据机理性陆地生态过程 (SiB3-OCS)^[24] 模拟或根据 GPP 缩放 (式 1)。SiB3-OCS 模拟植被 OCS 通量如下:

$$F_{\text{ocs}} = [\text{OCS}]_a \times [1.94/g_{\text{sw}} + 1.56/g_{\text{bw}} + 1.0/g_{\text{ocs}}]^{-1} \quad (5)$$

式中, F_{ocs} 表示植被 OCS 吸收通量, $[\text{OCS}]_a$ 表示 OCS 环境浓度, g_{sw} , g_{bw} 和 g_{ocs} 分别表示气孔导度、边界导度和叶肉及酶生化作用决定的综合导度。

土壤是 OCS 的一个主要的汇,其通量模拟有多种方法。Kettle 等^[25] 计算土壤 OCS 通量的方法是根据 Kesselmeier 等^[26] 的研究将土壤的 OCS 吸收通量表示为环境 OCS 浓度、温度和土壤湿度的函数。Berry 等^[24] 基于 SiB3 模型模拟的异养呼吸、土壤温度和水分进行土壤 OCS 吸收通量的估算。研究还发现,土壤 OCS 吸收与 H₂ 吸收紧密联系,可根据土壤吸收 H₂ 的比例关系计算土壤 OCS 吸收通量^[27]。另外,土壤在特定条件下也可能成为 OCS 源,在一定的高温和湿度条件下,土壤也会释放 OCS,在农业区尤为明显^[11,28]。本文采用 Launois 等^[14] 基于 OCS 与 H₂ 土壤吸收关系计算的 OCS 土壤通量,采用了其中的 Whelan-Bousquet 版本,其考虑了土壤 OCS 释放。

除植被和土壤 OCS 通量外,还考虑了人类活动、海洋、生物燃烧和平流层 OH 作用消耗 OCS 通量等。人类活动主要是化石燃料的使用会释放 OCS。利用工业生产统计调查数据, Kettle 等^[25] 得到了人类活动排放的 OCS 通量。海洋是主要的 OCS 源。Kettle 等^[25] 利用耦合的理化模型估算了海洋直接释放的 OCS 通量、CS₂ 间接转化的 OCS 通量和 DMS 间接通转化为 OCS 通量。然而, Berry 等^[24] 研究发现估算的全球 OCS 收支不能平衡,原因是全球海洋 OCS 通量估算偏低。这一发现被 TES 卫星观测数据所证实^[29]。Launois 等^[14] 利用海洋地球化学模型重新估算了海洋通量,进一步证实了 Berry 等^[24] 提出的海洋通量低估问题。本文使用 Launois 等^[14] 海洋 OCS 通量作为模拟输入。生物燃烧释放和平流层 OH 作用消耗也会影响大气 OCS 浓度的变化,但作用相对较小。这些数据的具体信息如表 3 所示。

表 3 使用的 OCS 通量数据信息
Table 3 Specific information of the OCS fluxes involved in the atmosphere-biosphere exchange

组分通量 Component flux	时间分辨率 Temporal resolution	数据来源 Data source
植被吸收 Plant uptake	3h	SiB3-OCS, GPP 比例缩放
土壤吸收 Soil uptake	多年月均	根据 H ₂ 吸收比例估算
土壤释放 Soil release	6h	Launois 等 ^[14]
海洋 Ocean	多年月均	Launois 等 ^[14]
人类活动 Anthropogenic	多年月均	Kettle 等 ^[25]
生物燃烧 Biomass burning	多年月均	Kettle 等 ^[25]
平流层 OH 消耗 Tropospheric OH oxidation	多年月均	Launois 等 ^[14]

2 结果

2.1 不同模型模拟的北美陆地生态系统碳通量季节变化和空间分布比较

不同生态过程模型模拟的陆地生态系统碳通量具有较大的差异。以 CASA-GFED3 (CarbonTracker CT2013B 版本的产品采用该模拟作为先验通量,月平均值),SiB3 和 SiBCASA 3 个模型为例,分析北美地区 2010 年陆地碳通量模拟结果在季节变化(图 3)和夏季生长季峰期空间分布(图 4)的差异。从图 3 可以看出,3 个模型模拟的 GPP、Reco 和 NEE 的季节变化在时相和幅度上都有明显差异,GPP 和 Reco 的差异尤为明显。GPP 幅度从大到小排序为:CASA-GFED3>SiBCASA>SiB3。Reco 和 NEE 的季节变化幅度的大小排序与 GPP 一致。从 GPP 时相来看,CASA-GFED3 模型和 SiBCASA 模型比 SiB3 模型更早达到最大峰值。从图 4 可以看出,3 个模型模拟的 GPP、Reco 和 NEE 的生长季峰期的空间分布总体较为一致,峰值分布在北美玉米带和农业区;从强度看,CASA-GFED3 模拟值均较高于其他模型。

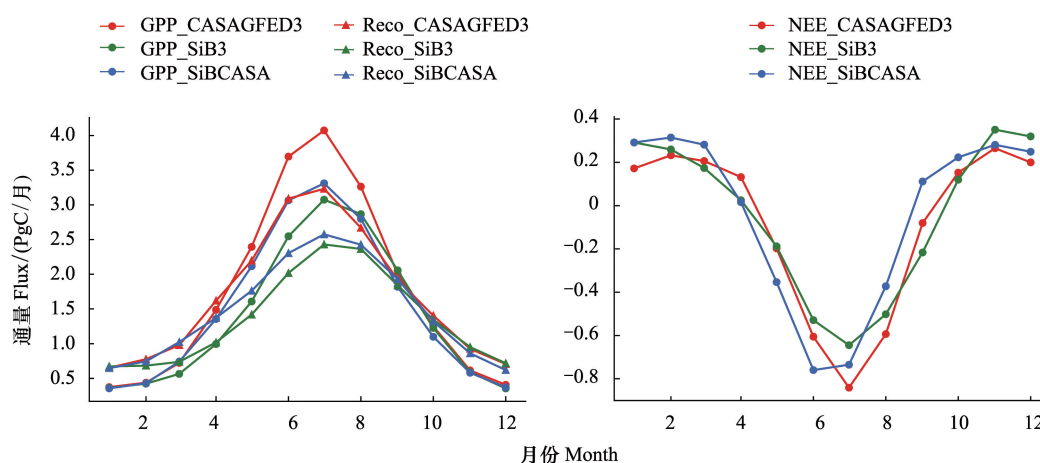


图 3 不同模型模拟的北美地区 2010 年陆地生态系统植被光合吸收(GPP)、呼吸释放(Reco)和净生态系统碳交换量(NEE)季节变化

Fig.3 Seasonal variations of GPP, Reco and NEE of North America in 2010 simulated from different models

2.2 站点模拟浓度的生态系统和其他组分贡献

基于上述 CO_2 通量组分和侧边界条件数据和 WRF-STILT 模型,模拟了各站点 2010 年大气 CO_2 浓度。以 LEF 高塔站点为例,其模拟的各地表通量组分对大气 CO_2 浓度贡献如图 5 所示。LEF 站点位于美国威斯康辛州的农业区,植被对大气 CO_2 浓度变化的贡献最大,冬季和春季早期主要表现为因生态系统呼吸而释放 CO_2 ,夏季因植被光合大于呼吸而吸收 CO_2 (图 5)。各地表组分的扰动对大气浓度的贡献最大达到约为 $20 \mu\text{mol/mol}$,显著地改变了背景浓度。

基于 OCS 地表通量、侧边界条件数据和 WRF-STILT 模型可以模拟不同观测站点的大气 OCS 浓度。图 6 显示了模拟的 2010 年 LEF 高塔站点大气 OCS 浓度的不同地表通量分量贡献。可以看出,在冬季和春季之间人类活动排放的 OCS 对 LEF 站点的大气 OCS 浓度影响最大,在夏季土壤 OCS 通量的影响最大。

2.3 基于大气 CO_2 和 OCS 数据的生态系统碳通量模拟的不确定性分析

陆地生态系统显著调节大气 OCS 和 CO_2 浓度的季节变化,从大气 OCS 和 CO_2 浓度观测数据可以获得陆地生态系统和大气碳交换的相关信息。本节利用不同生态过程模型模拟的 OCS 和 CO_2 通量驱动 WRF-STILT 模型,模拟大气 OCS 和 CO_2 浓度,与观测数据对比,分析不同模型模拟碳通量的不确定性,如季节变化幅度和时相。图 7 和图 8 为 LEF 和 WGC 两个高塔站点 2010—2011 年的基于不同模型陆地碳通量的大气 OCS 和 CO_2 浓度模拟值与观测值的比较。

在 LEF 站点,基于 CASA-GFED3 输出的生态系统通量模拟的大气 CO_2 浓度与观测数据较为吻合,但 OCS

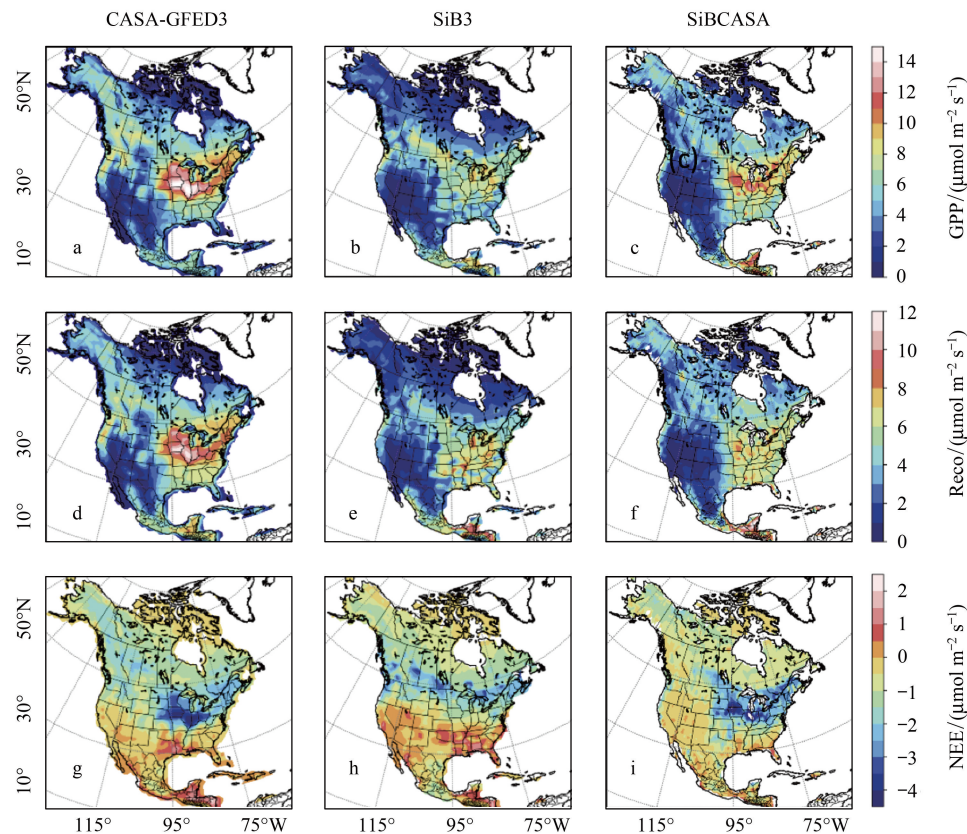


图4 不同模型模拟的2010年夏季(6—8月)GPP、Reco和NEE平均值的空间分布

Fig.4 Spatial distribution of average GPP, Reco and NEE in the summer (June—August) of 2010 simulated from three different models

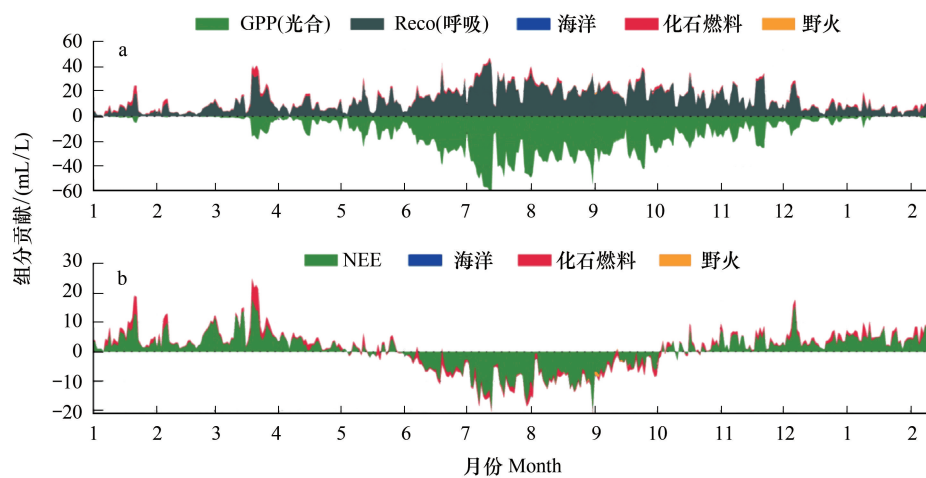


图5 2010年LEF高塔站点的模拟大气CO₂浓度的不同地表通量贡献

Fig.5 Contributions of different surface CO₂ fluxes to the simulated CO₂ concentration at the LEF tower site in 2010

的模拟浓度在夏季明显偏高,且峰值延迟出现,说明CASA-GFED3模拟的GPP偏低。

在WGC站点,基于SiBCASA模型输出陆地生态系统通量模拟的大气CO₂浓度在冬季明显偏低,无法模拟峰值;SiBCASA模拟OCS结果在冬季明显偏高,无法模拟谷值;相反,SiB3能较好模拟峰值和谷值。假设植被信号主导,说明SiBCASA在夏季所模拟的GPP偏高,冬季GPP明显偏低,这与SiBCASA与SiB3模拟的

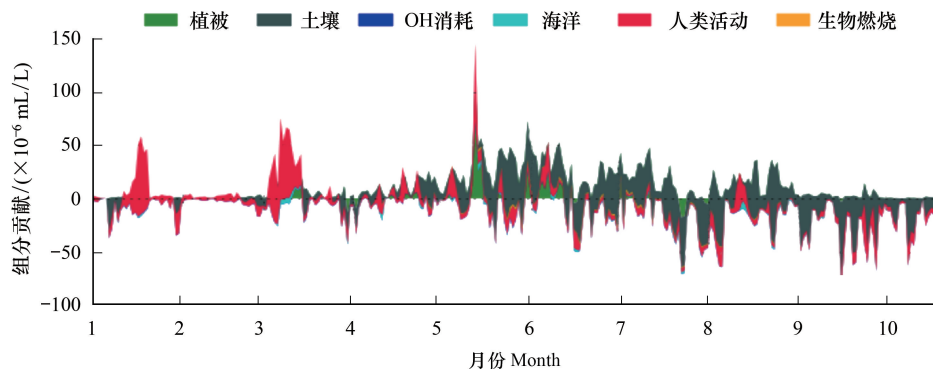


图 6 2010 年 LEF 高塔站点的模拟大气 OCS 浓度的不同地表通量贡献

Fig.6 Contributions of different surface OCS fluxes to the simulated OCS concentration at the LEF tower site in 2010

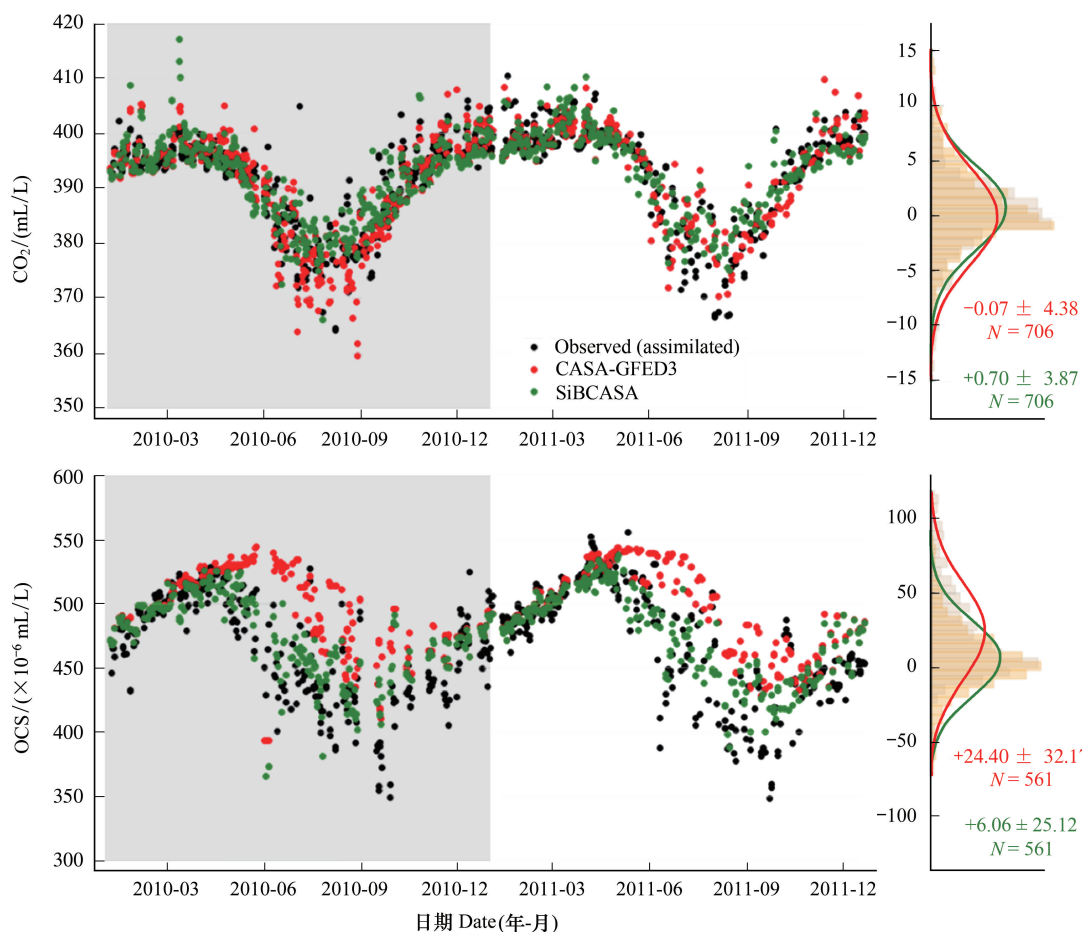


图 7 LEF 高塔站点基于不同生态过程模型输出的地表通量模拟的 2010—2011 年大气 CO_2 和 OCS 浓度与观测数据的比较 (右侧直方图显示的是模拟与观测浓度之间残差拟合的正态分布)

Fig.7 Comparisons between the simulated and observed CO_2 and OCS at the LEF tower site over 2010—2011 with the biosphere fluxes simulated from different models. The right side shows fitted normal distributions of the residuals between simulated and observed concentrations

GPP 季节变化幅度差异是一致的(见图 3)。从 CO_2 信号可以看出, SiBCASA 在冬季所模拟的 NEE 偏低。

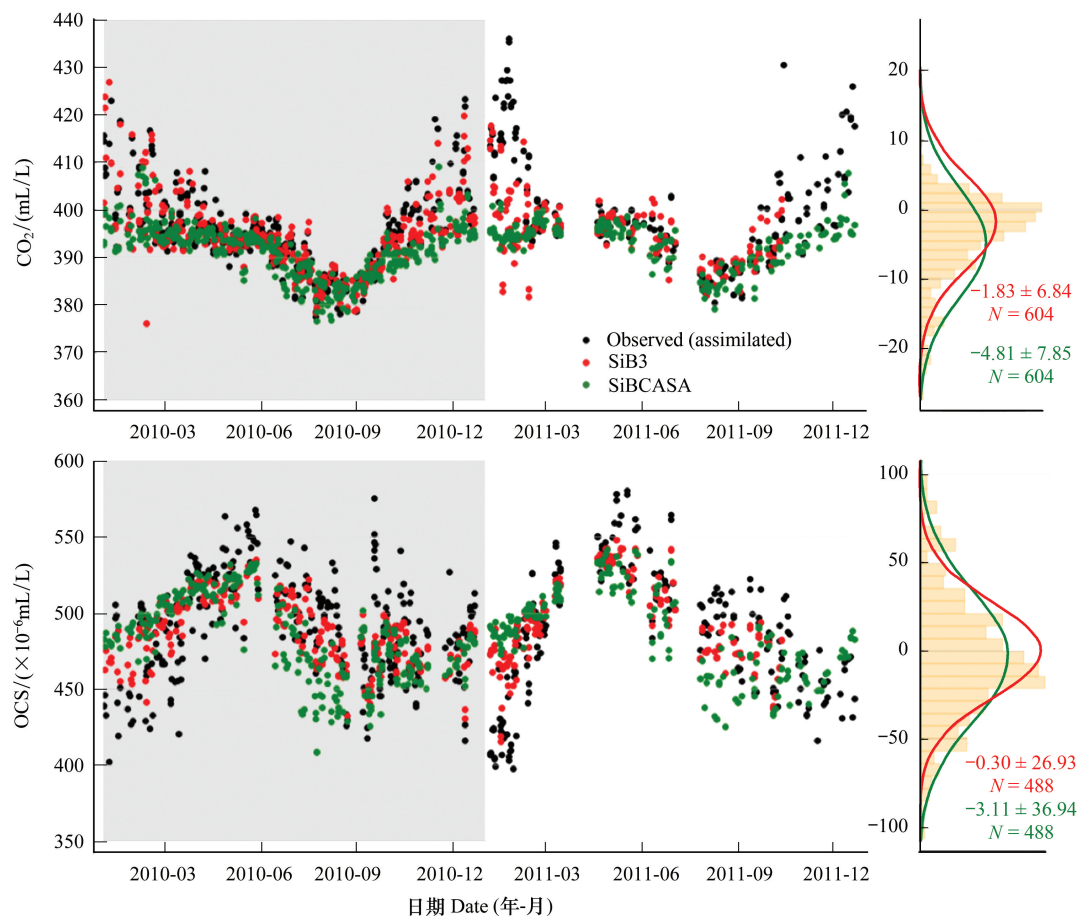


图 8 WGC 站点基于不同生态过程模型输出的地表通量模拟的 2010—2011 年大气 CO_2 和 OCS 浓度与观测比较(右侧直方图显示的是模拟与观测浓度之间残差拟合的正态分布)

Fig.8 Comparisons between the simulated and observed CO_2 and OCS at the WGC tower site over 2010—2011 with the biosphere fluxes simulated from different models. The right side shows fitted normal distributions of the residuals between simulated and observed concentrations

图 9 为基于不同生态过程模型(CASA-GFED3、SiB3 和 SiBCASA)输出的陆地生态系统碳通量模拟的所有高塔站点 2010—2011 年 CO_2 和 OCS 浓度的平均误差。从模拟的大气 OCS 浓度看,在 BAO、SCT、STR 和 WKT 四个站点,基于 SiB3 和 SiBCASA 输出生态系统通量的模拟值比观测数据偏低,说明 SiB3 和 SiBCASA 模型在这些站点足迹影响范围内的模拟 GPP 可能偏高。而基于 CASA-GFED3 模型输出的生态系统通量的模拟值偏高,说明其模拟的 GPP 可能偏低。从模拟的大气 CO_2 浓度看,基于 SiBCASA 输出的陆地生态系统通量的模拟值在较多站点(AMT、LEF、SCT、WBI 和 WKT)高于观测值,说明该模型在这些站点足迹影响范围内所模拟的 NEE(绝对值)偏低;在 3 个城市附近站点(BAO、STR 和 WGC)模拟的大气 CO_2 浓度低于观测值,可能因为其模拟的 NEE 偏高或人为碳排放估算偏低,而後者的可能性更大。基于 SiB3 模型输出碳通量的模拟值在较多的站点与观测值接近,但在上述 3 个城市站点明显低于观测值,很可能是由于人为碳排放估算偏低造成的。而基于 CASA-GFED3 模型输出的碳通量的模拟值在较多的站点低于观测值,说明该模型模拟的 NEE 偏高,这与图 3 和图 4 所示一致。

根据 CO_2 和 OCS 浓度模拟值与观测值的一致性,总体来说, SiB3 模型对北美地区陆地生态系统碳通量的模拟较好, CASA-GFED3 对 GPP 的模拟误差较大。

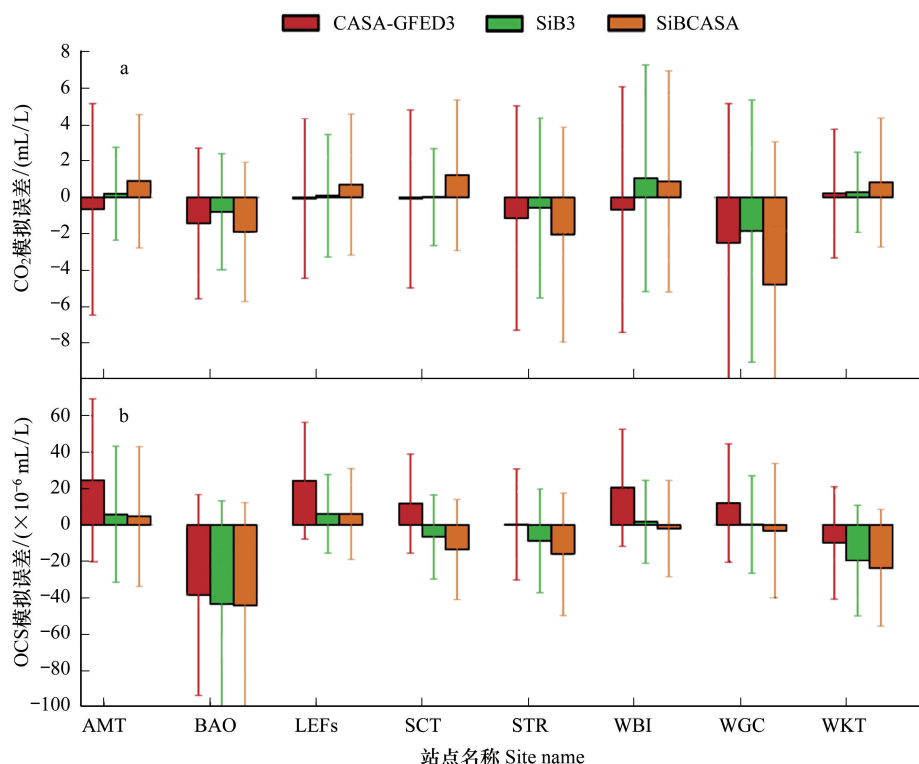


图9 基于不同模型输出的陆地生态系统碳通量模拟的所有站点2010—2011年CO₂和OCS浓度的平均误差

Fig.9 Average errors of simulated atmospheric CO₂ and OCS concentrations with terrestrial fluxes output from three different models at all tower sites over 2010—2011

3 讨论

本文的研究证实了大气CO₂和OCS浓度数据可用于评估生态系统模型在碳通量模拟中的不确定性。通过大气浓度模拟与实测比较,可以对陆地生态系统碳通量所模拟的季节变化时相和幅度的合理性进行评估。在北美地区, SiB3能很好地模拟陆地生态系统GPP和NEE的季节变化时相和幅度,而CASA-GFED3和SiBCASA模拟NEE和GPP的季节变化时表现较不理想。CASA-GFED3模拟的净陆地生态系统碳通量整体偏高,这可能与该模型没有考虑土壤水分胁迫等环境因素对GPP等的影响有关。CASA-GFED3、SiB3和SiBCASA 3个模型在模型结构和输入数据方面的差异是造成其模拟差异的原因,也是其碳通量模拟不确定的主要来源。

同时,本研究还存在一些局限。首先,OCS观测站点的数量有限,对碳通量的时空变化刻画具有一定的局限。其次,土壤OCS等组分通量的不确定性对结果有一定的影响。土壤的OCS大气交换既包括吸收也包括释放,土壤OCS的释放取决于温度、水分和环境OCS浓度^[11],对于后者需要在模型中量化,特别是在农业区,还未能很好地模拟这一变量。第三,OCS与CO₂的叶片相对吸收比(LRU)是随时间和空间变化的^[10,30],本文没有考虑其时空变化。目前仍难以获取LRU大尺度时空变化信息,大多数研究将其看作一个近似常量、仅对C3和C4植被类型予以区分。

尽管如此,在其他输入数据具有相同不确定性的条件下,不同模型的模拟效果差异是客观存在的,因此本文提出的方法能有效评估不同生态系统模型的碳通量模拟效果。在传统的碳循环模型评估中,常利用站点的涡度相关测量作为评判模型模拟效果优劣的标准,但是这种方法是不全面的。模型在站点尺度能较好模拟碳通量,但不能保证其区域上的模拟效果,其主要原因是站点的数量和代表性有限以及从站点到区域的尺度差

异。长期以来,在区域尺度检验模型表现比较困难,缺少基于观测的标定数据。大气 CO_2 和 OCS 浓度以及植被叶绿素荧光是近年来发展的有效标定区域尺度碳通量的数据。利用 CO_2 和 OCS 这两种数据对碳通量模拟的碳通量或模型参数进行优化计算,可以提高区域尺度陆地生态系统碳通量估算精度。

当前,基于高塔站点观测的 CO_2 和 OCS 均较为有限,其中 OCS 的观测更是主要集中在北美区域。随着无人飞机、飞艇、飞机和卫星遥感等多种平台观测技术的发展,时空覆盖更广更密集的 CO_2 和 OCS 浓度数据正在被获取。 CO_2 卫星数据提取精度在逐步提高,已被应用于全球碳通量估算;OCS 卫星数据提取方法也在发展中,已被应用于碳循环研究。除了数据外,对 CO_2 和 OCS 源汇的认识和建模也在不断完善。在数据精度逐步提高和理论方法不断完善的背景下,本文的方法将有望更好地服务于陆地碳循环模型评价与全球及区域陆地生态系统碳通量模拟研究。

4 结论

本文利用大气 CO_2 和 OCS 的观测数据,基于 WRF-STILT 粒子扩散模型进行大气输送建模,评价了 3 个典型陆地生态系统模型(CASA-GFED3、SiB3 和 SiBCASA)模拟 GPP 和 NEE 通量的不确定性。结果表明, SiB3 能很好地模拟北美陆地生态系统 GPP 和 NEE 的季节变化时相和幅度,在 3 个模型中具有最佳的模拟能力; CASA-GFED3 模拟的 NEE 季节变化较为理想,但对生长季 GPP 的模拟存在较大的误差, SiBCASA 模型在模拟冬季晚期和春季早期的 NEE 和 GPP 峰值时表现较不理想。本研究证明了大气 CO_2 和 OCS 在评估陆地生态系统模型碳通量模拟的不确定性中的潜力,为利用它们优化计算(优化生态模型参数或通量)区域和全球陆地生态系统碳通量提供了理论支撑。

致谢: NOAA 地球系统研究实验室提供大气 CO_2 观测数据和 Steve Montzka 提供 OCS 观测数据。NOAA CarbonTracker 团队提供 CT2013B 同化数据。NASA 提供 CASA-GFED3 模拟数据。美国科罗拉多大学 Ian Baker 和 NOAA 地球系统研究实验室 Ivar van der Velde 提供 SiB3 和 SiBCASA 模型碳通量模拟数据。Arlyn Andrews 提供 WRF-STILT 大气输送足迹数据,荷兰格罗宁根大学 Huilin Chen 在 WRF-STILT 大气模拟等方面给予指导,特此致谢。

参考文献(References):

- [1] Messerschmidt J, Parazoo N, Wunch D, Deutscher N M, Roehl C, Warneke T, Wennberg P O. Evaluation of seasonal atmosphere-biosphere exchange estimations with TCCON measurements. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2013, 13(10): 5103-5115.
- [2] Fang Y, Michalak A M, Shiga Y P, Yadav V. Using atmospheric observations to evaluate the spatiotemporal variability of CO_2 fluxes simulated by terrestrial biospheric models. *Biogeosciences*, 2014, 11(23): 6985-6997.
- [3] Frankenberg C, Kulawik S S, Wofsy S C, Chevallier F, Daube B, Kort E A, O'Dell C, Olsen E T, Osterman G. Using airborne HIAPER Pole-to-Pole Observations (HIPPO) to evaluate model and remote sensing estimates of atmospheric carbon dioxide. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16(12): 7867-7878.
- [4] Peng S S, Ciais P, Chevallier F, Peylin P, Cadule P, Sitch S, Piao S L, Ahlström A, Huntingford C, Levy P, Li X R, Liu Y W, Lomas M, Poulter B, Viovy N, Wang T, Wang X H, Zaehle S, Zeng N, Zhao F, Zhao H F. Benchmarking the seasonal cycle of CO_2 fluxes simulated by terrestrial ecosystem models. *Global Biogeochemical Cycles*, 2015, 29(1): 46-64.
- [5] Byrne B, Wunch D, Jones D B A, Strong K, Deng F, Baker I, Köhler P, Frankenberg C, Joiner J, Arora V K, Badawy B, Harper A B, Warneke T, Petri C, Kivi R, Roehl C M. Evaluating GPP and respiration estimates over northern midlatitude ecosystems using solar-induced fluorescence and atmospheric CO_2 measurements. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2018, 123(9): 2976-2997.
- [6] Wehr R, Munger J W, McManus J B, Nelson D D, Zahniser M S, Davidson E A, Wofsy S C, Saleska S R. Seasonality of temperate forest photosynthesis and daytime respiration. *Nature*, 2016, 534(7609): 680-683.
- [7] Hilton T W, Whelan M E, Zumkehr A, Kulkarni S, Berry J A, Baker I T, Montzka S A, Sweeney C, Miller B R, Campbell J E. Peak growing season gross uptake of carbon in North America is largest in the Midwest USA. *Nature Climate Change*, 2017, 7(6): 450-454.
- [8] Hilton T W, Zumkehr A, Kulkarni S, Berry J, Whelan M E, Campbell J E. Large variability in ecosystem models explains uncertainty in a critical parameter for quantifying GPP with carbonyl sulphide. *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology*, 2015, 67(1): 26329.
- [9] Montzka S A, Calvert P, Hall B D, Elkins J W, Conway T J, Tans P P, Sweeney C. On the global distribution, seasonality, and budget of

- atmospheric carbonyl sulfide (COS) and some similarities to CO₂. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2007, 112(D9): D09302.
- [10] Stimler K, Montzka S A, Berry J A, Rudich Y, Yakir D. Relationships between carbonyl sulfide (COS) and CO₂ during leaf gas exchange. *New Phytologist*, 2010, 186(4): 869-878.
- [11] Whelan M E, Rhew R C. Carbonyl sulfide produced by abiotic thermal and photodegradation of soil organic matter from wheat field substrate. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2015, 120(1): 54-62.
- [12] Campbell J E, Carmichael G R, Chai T, Mena-Carrasco M, Tang Y, Blake D R, Blake N J, Vay S A, Collatz G J, Baker I, Berry J A, Montzka S A, Sweeney C, Schnoor J L, Stanier C O. Photosynthetic control of atmospheric carbonyl sulfide during the growing season. *Science*, 2008, 322(5904): 1085-1088.
- [13] Asaf D, Rotenberg E, Tatarinov F, Dicken U, Montzka S A, Yakir D. Ecosystem photosynthesis inferred from measurements of carbonyl sulphide flux. *Nature Geoscience*, 2013, 6(3): 186-190.
- [14] Launois T, Peylin P, Belviso S, Poulter B. A new model of the global biogeochemical cycle of carbonyl sulfide-Part 2: use of carbonyl sulfide to constrain gross primary productivity in current vegetation models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2015, 15(16): 9285-9312.
- [15] Andrews A E, Kofler J D, Trudeau M E, Williams J C, Neff D H, Masarie K A, Chao D Y, Kitzis D R, Novelli P C, Zhao C L, Dlugokencky E J, Lang P M, Crotwell M J, Fischer M L, Parker M J, Lee J T, Baumann D D, Desai A R, Stanier C O, De Wekker S F J, Wolfe D E, Munger J W, Tans P P. CO₂, CO, and CH₄ measurements from tall towers in the NOAA earth system research laboratory's global greenhouse gas reference network: instrumentation, uncertainty analysis, and recommendations for future high-accuracy greenhouse gas monitoring efforts. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2014, 7(2): 647-687.
- [16] Sweeney C, Karion A, Wolter S, Newberger T, Guenther D, Higgs J A, Andrews A E, Lang P M, Neff D, Dlugokencky E, Miller J B, Montzka S A, Miller B R, Masarie K A, Biraud S C, Novelli P C, Crotwell M, Crotwell A M, Thoning K, Tans P P. Seasonal climatology of CO₂ across North America from aircraft measurements in the NOAA/ESRL Global Greenhouse Gas Reference Network. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2015, 120(10): 5155-5190.
- [17] Lin J C, Gerbig C, Wofsy S C, Andrews A E, Daube B C, Davis K J, Grainger C A. A near-field tool for simulating the upstream influence of atmospheric observations: the Stochastic Time-Inverted Lagrangian Transport (STILT) model. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2003, 108(D16): 4493.
- [18] Nehrkorn T, Eluszkiewicz J, Wofsy S C, Lin J C, Gerbig C, Longo M, Freitas S. Coupled weather research and forecasting-stochastic time-inverted lagrangian transport (WRF-STILT) model. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 2010, 107(1/2): 51-64.
- [19] Peters W, Jacobson A R, Sweeney C, Andrews A E, Conway T J, Masarie K, Miller J B, Bruhwiler L M P, Pétron G, Hirsch A I, Worthy D E J, van der Werf G R, Randerson J T, Wennberg P O, Krol M C, Tans P P. An atmospheric perspective on North American carbon dioxide exchange: carbontracker. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2007, 104(48): 18925-18930.
- [20] Van der Werf G R, Randerson J T, Giglio L, Collatz G J, Mu M, Kasibhatla P S, Morton D C, DeFries R S, Jin Y, van Leeuwen T T. Global fire emissions and the contribution of deforestation, savanna, forest, agricultural, and peat fires (1997-2009). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2010, 10(23): 11707-11735.
- [21] Baker I T, Prihodko L, Denning A S, Goulden M, Miller S, Da Rocha H R. Seasonal drought stress in the Amazon: reconciling models and observations. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2008, 113(G1): G00B01.
- [22] Schaefer K, Collatz G J, Tans P, Denning A S, Baker I, Berry J, Prihodko L, Suits N, Philpott A. Combined simple biosphere/Carnegie-Ames-Stanford approach terrestrial carbon cycle model. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2008, 113(G3): G03034.
- [23] van der Velde I R, Miller J B, Schaefer K, van der Werf G R, Krol M C, Peters W. Terrestrial cycling of ¹³CO₂ by photosynthesis, respiration, and biomass burning in SiBCASA. *Biogeosciences*, 2014, 11(23): 6553-6571.
- [24] Berry J, Wolf A, Campbell J E, Baker I, Blake N, Blake D, Denning A S, Kawa S R, Montzka S A, Seibt U, Stimler K, Yakir D, Zhu Z X. A coupled model of the global cycles of carbonyl sulfide and CO₂: a possible new window on the carbon cycle. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 2013, 118(2): 842-852.
- [25] Kettle A J, Kuhn U, Von Hobe M, Kesselmeier J, Andreae M O. Global budget of atmospheric carbonyl sulfide: temporal and spatial variations of the dominant sources and sinks. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2002, 107(D22): 4658.
- [26] Kesselmeier J, Teusch N, Kuhn U. Controlling variables for the uptake of atmospheric carbonyl sulfide by soil. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1999, 104(D9): 11577-11584.
- [27] Belviso S, Schmidt M, Yver C, Ramonet M, Gros V, Launois T. Strong similarities between night-time deposition velocities of carbonyl sulphide and molecular hydrogen inferred from semi-continuous atmospheric observations in Gif-sur-Yvette, Paris region. *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology*, 2013, 65(1): 20719.
- [28] Whelan M E, Hilton T W, Berry J A, Berkelhammer M, Desai A R, Campbell J E. Carbonyl sulfide exchange in soils for better estimates of ecosystem carbon uptake. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16(6): 3711-3726.
- [29] Kuai L, Worden J R, Campbell J E, Kulawik S S, Li K F, Lee M, Weidner R J, Montzka S A, Moore F L, Berry J A, Baker I, Denning A S, Bian H S, Bowman K W, Liu J J, Yung Y L. Estimate of carbonyl sulfide tropical oceanic surface fluxes using Aura Tropospheric Emission Spectrometer observations. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2015, 120(20): 11012-11023.
- [30] Kooijmans L M J, Maseyk K, Seibt U, Sun W, Vesala T, Mammarella I, Kolari P, Aalto J, Franchin A, Vecchi R, Valli R, Chen H L. Canopy uptake dominates nighttime carbonyl sulfide fluxes in a boreal forest. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2017, 17(18): 11453-11465.