

## ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИКИ АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

УДК 551.554.7

А.Ю. Топтыгин<sup>1</sup>, К.Г. Грибанов<sup>1</sup>, В.И. Захаров<sup>1</sup>,  
Y. Kasai<sup>2</sup>, A. Kagawa<sup>2</sup>, Y. Murayama<sup>2</sup>, R. Imasu<sup>3</sup>, G.A. Schmidt<sup>4</sup>,  
G. Hoffmann<sup>5</sup>, J. Jouzel<sup>5</sup>

# Определение вертикального профиля HDO/H<sub>2</sub>O из спектров пропускания атмосферы высокого разрешения

<sup>1</sup>Уральский государственный университет, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>National Institute of Information and Communications Technology (NICT), Tokyo, Japan

<sup>3</sup>Center for Climate System Research, University of Tokyo, Japan

<sup>4</sup>NASA Goddard Institute for Space Studies and Center for Climate System Research,  
Columbia University, New York, USA

<sup>5</sup>IPSL/Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, Gif-sur-Yvette, France

Поступила в редакцию 12.09.2006 г.

Предложен метод определения вертикальных профилей относительного содержания HDO к H<sub>2</sub>O в атмосфере из ИК-спектров пропускания атмосферы, получаемых наземными Фурье-спектрометрами высокого разрешения и спектрометром FTIR. Была использована линейная регрессия между коэффициентами разложения профилей HDO по собственным векторам ковариационной матрицы априорных профилей и коэффициентами разложения спектров по собственным векторам спектральной ковариационной матрицы для определения вертикального профиля HDO/H<sub>2</sub>O из наблюдаемых спектров пропускания атмосферы. Ошибка метода была оценена из замкнутых модельных экспериментов с синтетическими спектрами FTIR, ее абсолютное значение по профилю варьируется от 5 до 65‰. Для относительного содержания тяжелой воды во всем атмосферном столбе абсолютная ошибка метода составила не более 8‰.

Для апробации предлагаемого метода на натурных экспериментах использованы данные, полученные спектрометром FTIR, расположенным на Аляске. Значения относительного содержания тяжелой воды в атмосфере, взятые из образцов спектров пропускания атмосферы на Аляске, наблюдавшихся в 2000–2004 гг., сравниваются с результатами отношения HDO/H<sub>2</sub>O, полученными из моделей общей циркуляции атмосферы.

## Введение

Данные по измерению изотопов HDO, H<sub>2</sub><sup>18</sup>O как в осадках, так и в атмосферном водяном паре необходимы для того, чтобы улучшить количественное описание процессов испарения и конденсации влаги, определяющих глобальную циркуляцию воды между океаном, атмосферой и сушей [1–7].

Количественно содержание дейтерия в атмосферном слое выражается через отношение [8]:

$$\delta\text{HDO} = (\alpha_{\text{HDO}}/\alpha_{\text{HDO}}^0 - 1) \cdot 1000\%, \quad (1)$$

где  $\alpha_{\text{HDO}}$  – отношение числа молекул изотопомера HDO к числу молекул основного изотопомера воды в слое;  $\alpha_{\text{HDO}}^0 = 3,1069 \cdot 10^{-4}$  – среднее значение этого отношения в океанической воде (естественная распространенность). Относительное содержание дейтерия (%) во всем атмосферном столбе выражается в следующем виде:

$$\delta\text{HDO}^* = \int_0^H N_{\text{H}_2\text{O}}(h) \delta\text{HDO}(h) dh / \int_0^H N_{\text{H}_2\text{O}}(h) dh, \quad (2)$$

где  $H$  – верхняя граница атмосферы;  $N_{\text{H}_2\text{O}}(h)$  – концентрация водяного пара. Учитывая процессы фракционирования изотопов при испарении и конденсации воды, можно сделать вывод, что величина  $\delta\text{HDO}$  в атмосфере лежит в пределах от –1000 до 0‰.

Наша задача состояла в разработке метода определения вертикальных профилей  $\delta\text{HDO}$  из спектров пропускания атмосферы высокого разрешения и апробации метода на данных наземного FTIR.

Спектрометр FTIR, установленный на Аляске (65,11° с.ш.; 147,42° з.д.), измерял спектральную яркость прошедшего атмосферу солнечного излучения в диапазоне 750–4300 см<sup>–1</sup> с разрешением около 0,002 см<sup>–1</sup> [9–11]. Для анализа был выбран интервал из участка спектра 1204,5–1207,5 см<sup>–1</sup>, содержащий практически изолированные линии поглощения изотопомера HDO. Спектральный шаг измерений FTIR составлял ~0,003 см<sup>–1</sup>, и интервал в 3 см<sup>–1</sup> содержал ~1000 точек. Для приведения измеренного и модельных спектров к одной аппаратной функции и единой спектральной сетке исходные спектры подвергались дополнительной свертке с аппаратной функцией Гаусса полуширины 0,01 см<sup>–1</sup> и шагом сетки 0,01 см<sup>–1</sup>.

В качестве априорной информации об атмосферных параметрах над исследуемой областью Аляски использовались:

1) набор данных модели общей циркуляции атмосферы (МОЦА), учитывающей изотопное разделение воды (высотные профили давления, температуры, концентрации водяного пара и профили  $\delta\text{HDO}$ ) [12];

2) зондовые измерения в данном районе (соответствующие месту и времени обрабатываемого спектра), включающие высотные профили давления, температуры и влажности;

3) модельные профили основных изотопомеров остальных газов ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$  и т.д.).

Расчет спектров в прямой модели производился с использованием данных зондовых измерений (давление, температура, влажность), модельных данных для основных поглощающих газов и данных МОЦА, отобранных для исследуемого региона и сезона (профили  $\delta\text{HDO}$ , в том числе и для построения ковариационных матриц).

## Спектральная функция пропускания

Функция пропускания атмосферы на данной частоте может быть записана [13] в следующем виде:

$$T(v) = \exp[-\tau_{\text{HDO}}(v) - \tau_0(v)]. \quad (3)$$

Здесь  $\tau_{\text{HDO}}(v)$  — оптическая толщина, обусловленная поглощением молекулами изотопомера HDO,  $\tau_0(v)$  — оптическая толщина, обусловленная поглощением остальных газов и аэрозольным ослаблением излучения. При условии, что для выбранного набора спектральных каналов зависимостью  $\tau_0$  от волнового числа можно пренебречь, запишем:

$$\begin{aligned} \frac{T(v)}{T(v^*)} &= \frac{\exp[-\tau_{\text{HDO}}(v) - \tau_0]}{\exp[-\tau_{\text{HDO}}(v^*) - \tau_0]} = \\ &= \exp[-\tau_{\text{HDO}}(v) + \tau_{\text{HDO}}(v^*)], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $v^*$  — волновое число канала сравнения. В качестве  $v^*$  нами была выбрана точка с частотой 1206,7 см<sup>-1</sup> в крыле линии HDO. Формула (4) составляет основу дифференциальной абсорбционной спектроскопии [14]. Таким образом, можно получить выражение для разности оптической толщины, обусловленной поглощением только молекулами HDO в измеренном участке спектра:

$$\Delta\tau_{\text{HDO}}(v) = \tau_{\text{HDO}}(v) - \tau_{\text{HDO}}(v^*) = \ln(T(v^*)) - \ln(T(v)). \quad (5)$$

С другой стороны, пользуясь моделью расчета *line-by-line* для оптической толщины, можно записать

$$\begin{aligned} \tau_{\text{HDO}}(v) &= \int_0^H N_{\text{HDO}}(h) \left( \sum_j S_j[t(h)] \Phi_j[v_j - v, t(h), p(h)] \right) \times \\ &\quad \times \sec(\theta(h)) dh, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $N_{\text{HDO}}(h)$  — концентрация молекул HDO;  $p(h)$ ,  $t(h)$ ,  $\theta(h)$  — давление, температура и локальный зенитный угол наблюдения на высоте  $h$ ;  $S_j$  — интенсивность;  $v_j$  — волновое число центра и  $\Phi_j$  — профиль  $j$ -й линии HDO. Суммирование в (6) ведется по всем линиям HDO, которые вносят свой вклад в поглощение на данной частоте.

Ширина спектральной линии зависит от температуры и давления атмосферы на данной высоте. Если пренебречь самоширением спектральных линий HDO (парциальное давление HDO мало), то, используя параметризацию спектральной базы данных HITRAN [15], для лоренцевской полуширины спектральной линии можно записать:

$$\gamma(p, t) = \left( \frac{t_{\text{ref}}}{t} \right)^n \gamma(p_{\text{ref}}, t_{\text{ref}}) p, \quad (7)$$

где  $p$  — давление, бар;  $t$  — температура, К;  $t_{\text{ref}} = 296$  К;  $p_{\text{ref}} = 1$  атм;  $n$  — коэффициент температурной зависимости уширения воздухом. При расчете оптической толщины использовались спектральные параметры из базы данных HITRAN-2004 [16] и прямая модель FIRE-ARMS [17]. Для спектральных линий HDO, центры которых находятся в интервале 1206–1207 см<sup>-1</sup>, значение  $\gamma(p_{\text{ref}}, t_{\text{ref}})$  лежит в интервале 0,06–0,08 см<sup>-1</sup>/атм, а значение  $n$  — в интервале 0,59–0,64. Таким образом, значение  $\gamma(p, t)$  в тропосфере для летней субарктической модели может варьироваться в пределах 0,02–0,08 см<sup>-1</sup>, а следовательно, приборы FTIR наземного базирования с разрешением 0,002 см<sup>-1</sup> [9, 18, 19] предоставляют потенциальную возможность восстановления высотных профилей HDO из анализа спектров пропускания атмосферы, снятых с таким спектральным разрешением.

Весовые функции (рис. 1), определенные согласно [20] для (4), характеризуют чувствительность сигнала в линиях HDO функции пропускания атмосферы в данном спектральном интервале к вариациям концентрации HDO на различных высотах.

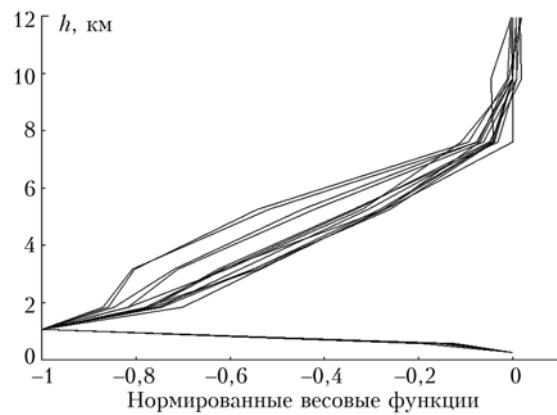


Рис. 1. Прорезанный набор весовых функций от прямой модели функции пропускания по вариациям профиля  $\delta\text{HDO}$  в спектральном интервале 1205,8–1206,6 см<sup>-1</sup>

## Эмпирические ортогональные функции

Для построения базиса эмпирических ортогональных функций (ЭОФ) в пространстве профилей [21] используются данные профилей δHDO МОЦА [12] для выбранного района на географической сетке и временного периода, соответствующие расположению спектрометра FTIR и времени измерений спектров. Разложение вектора профиля на фиксированной сетке высот можно записать следующим образом:

$$\delta\text{HDO} = \delta\text{HDO}_{\text{mean}} + \sum_{i=1}^N c_D^i \mathbf{u}_D^i, \quad (8)$$

где  $\delta\text{HDO}_{\text{mean}}$  – вектор среднего по набору профиля;  $N$  – число высот;  $c_D^i$  – коэффициенты разложения и  $\mathbf{u}_D^i$  – набор собственных векторов ковариационной матрицы профилей δHDO из МОЦА.

В данной статье для восстановления профилей δHDO используется методика сжатия спектральной информации [22], основанная на построении базиса ЭОФ в пространстве спектров. Базис представляет собой набор собственных векторов ковариационной матрицы измеренных спектров, нормированной с шумовой ковариационной матрицей измерений. Тогда разложение спектра имеет вид

$$\Delta\tau_{\text{HDO}} = \Delta\tau_{\text{HDO}}^{\text{mean}} + \sum_{i=1}^M c_R^i \mathbf{u}_R^i, \quad (9)$$

где  $\Delta\tau_{\text{HDO}}^{\text{mean}}$  – вектор опорного (среднего) спектра на заданной сетке волновых чисел;  $M$  – размерность базиса (число спектральных каналов);  $c_R^i$  – коэффициенты разложения;  $\mathbf{u}_R^i$  – набор базисных векторов (ЭОФ).

Размерность базиса можно ограничить исходя из условий приемлемости представления спектров при заданной погрешности измерений. Ввиду отсутствия достаточного количества измеренных спектров FTIR базис ЭОФ строится на модельных спектрах по схеме:

1. Из базы данных МОЦА выбирается набор профилей δHDO, покрывающих ряд значений по δHDO\* от  $-550$  до  $-50\%$ .

2. Для каждого профиля δHDO из набора производится модельный расчет функции пропускания в выбранном спектральном интервале с помощью ПО FIRE-ARMS. При этом такие параметры атмосферы, как профили температуры и влажности, соответствуют зондовым измерениям для обрабатываемого измеренного спектра.

3. К каждому модельному спектру набора добавляется нормально распределенный шум с нулевым средним и характерной для измеренных FTIR спектров пропускания атмосферы величиной сред-

неквадратического отклонения, равной 0,012. По зашумленному набору строится ковариационная матрица; находятся ЭОФ пропускания; подбирается размерность базиса.

Ограничиваая в разложении (9) число слагаемых, можно посчитать невязку полученного спектра с исходным спектром. Диагональ ковариационной матрицы невязок для всего набора спектров оценивает среднюю сумму остаточных членов в (9). Сравнивая эту диагональ с диагональю ковариационной матрицы ошибок измерения спектрометра, можно уменьшить размерность базиса ЭОФ. Оказалось, что при уровне ошибок измерения FTIR для представления вариаций спектров, вызванных изменением профиля δHDO, достаточно трех первых базисных векторов в качестве главных компонент.

## Линейная регрессия главных компонент

Методика по обработке отдельного измеренного спектра предполагает, что профили температуры, давления, концентраций атмосферных газов (кроме изотопомера δHDO) считаются известными (соответствуют одновременным зондовым измерениям); также известны геометрия и зенитный угол измерения спектра. Поэтому, варьируя профиль δHDO, можно подогнать измеренный и расчетный спектры.

Так как связь между вертикальным профилем δHDO и соответствующей ему оптической толщиной (6) является линейной, то, очевидно, и между главными компонентами (ГК) разложения профиля δHDO и ГК разложения оптической толщины имеется линейная связь. Пользуясь набором модельных «зашумленных» спектров, рассчитанных по профилям δHDO из МОЦА, можно построить линейную зависимость между ГК профилей δHDO и ГК спектров:

$$\mathbf{c}_D = \mathbf{B}\mathbf{c}_R. \quad (10)$$

Здесь  $\mathbf{c}_D$  – вектор коэффициентов разложения профиля в базисе профилей;  $\mathbf{c}_R$  – вектор коэффициентов разложения в базисе спектров оптической толщины;  $\mathbf{B}$  – матрица коэффициентов регрессии (размерности  $3 \times 3$ ). Коэффициенты регрессии находятся из соотношения [22]:

$$\mathbf{B}^T = (\mathbf{C}_R^T \cdot \mathbf{C}_R)^{-1} \cdot \mathbf{C}_R^T \cdot \mathbf{C}_D, \quad (11)$$

где  $\mathbf{C}_D$  – матрица, строки которой содержат транспонированные векторы коэффициентов разложения профилей из набора, для которых рассчитаны спектры пропускания;  $\mathbf{C}_R$  – аналогичная матрица соответствующих коэффициентов разложения в базисе спектров. Матрица в скобках в выражении (11) диагональная ввиду некоррелированности ГК. Решение для искомого профиля вычисляется по (10) при подстановке ГК измеренного спектра.

Оценка точности метода проводилась из восстановления модельных спектров пропускания, рассчитанных для тестового набора профилей δНDO, также сформированного из данных МОЦА. Диагональ ковариационной матрицы невязки исходных и восстановленных профилей служит оценкой погрешности восстановления профиля δНDO (рис. 2), ее абсолютное значение по профилю варьируется от 5 до 63%.

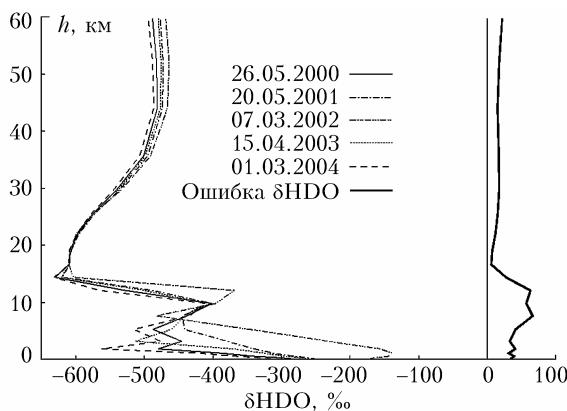


Рис. 2. Восстановленные из спектров FTIR профили  $\delta\text{HDO}$  для пяти измерений; среднеквадратическая ошибка восстановления профиля  $\delta\text{HDO}$ , полученная в замкнутых модельных экспериментах с модельными спектрами FTIR

Можно отметить, что при ограничении числа членов при разложении (8) модельных профилей  $\delta\text{HDO}$  до трех ГК (которые определяются в методе) ошибка такого разложения по отношению к исходным профилям не превышает 10%.

Аналогично (10) строится линейная регрессия для относительного содержания дейтерия во всем атмосферном столбе:

$$\delta\text{HDO}^* - \delta\text{HDO}_{\text{mean}}^* = \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{c}_R, \quad (12)$$

где  $\delta\text{HDO}_{\text{mean}}^*$  — среднее значение по набору профилей. Пользуясь этим соотношением, можно извлекать  $\delta\text{HDO}^*$  непосредственно из спектральных данных, а не рассчитывать по (2) из восстановленного профиля. Погрешность восстановления относительного содержания дейтерия в атмосферном столбе  $\delta\text{HDO}^*$  для обрабатываемых спектров составила < 8%.

## Результаты

Для апробации метода мы использовали пять измерений функций пропускания атмосферы прибором FTIR на Аляске в условиях чистого неба и соответствующие зондовые измерения вертикальных профилей температуры и влажности. Измерения проводились: 26.05.2000, 20.05.2001, 07.03.2002, 15.04.2003, 01.03.2004 г. Для всех измерений спектров были сформированы наборы модельных профилей  $\delta$ HDO, рассчитаны модельные спектры и про-

водилась процедура восстановления профиля δHDO и относительного содержания в столбе δHDO\*.

Восстановленные профили  $\delta$ HDO из пяти измеренных спектров FTIR приведены на рис. 2. На рис. 3 показан образец подгонки спектров: измеренного спектрометром FTIR, смоделированного в прямой модели FIRE-ARMS при восстановленном профиле дейтерия, и их разность. Средняя ошибка подгонки модельных и измеренных спектров составила 1.2%.

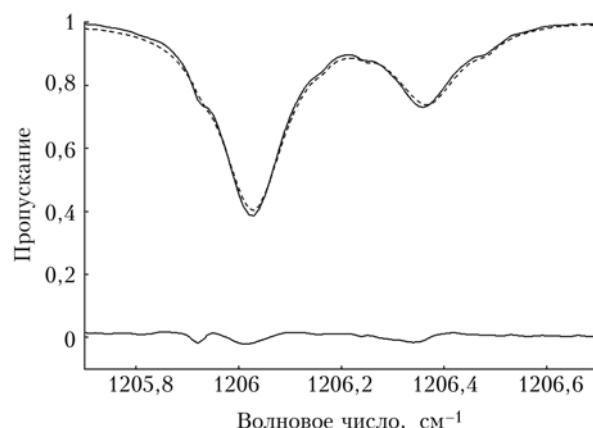


Рис. 3. Подгонка спектра, измеренного наземным FTIR на Аляске 01.03.2004 (зенитный угол наблюдения 72,73°, сплошная линия) и рассчитанного при восстановленном профиле дейтерия (штриховая), и их разница

На рис. 4 показаны значения  $\delta\text{HDO}^*$ , полученные из обработки имеющихся измерений FTIR, и годовой ход  $\delta\text{HDO}^*$ , вычисленный из МОЦА для этого региона Аляски. Представлены также величины  $\delta\text{HDO}$  у поверхности (на уровне  $\sim 1000$  гПа).

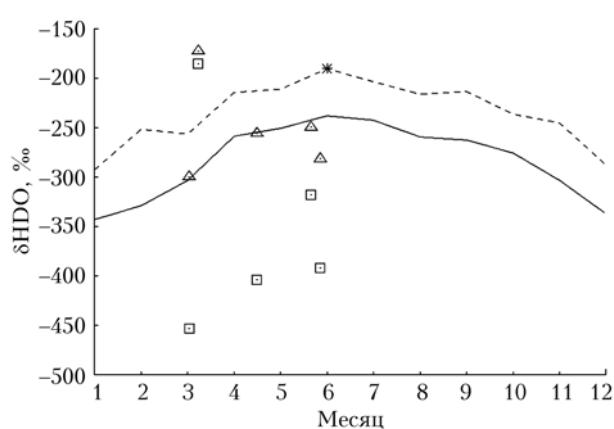


Рис. 4. Ход временного изменения относительного содержания  $\delta\text{HDO}$  в приземном слое (штриховая линия – данные МОЦА [12], треугольники – восстановленные значения) и во всем атмосферном столбе  $\delta\text{HDO}^*$  (сплошная линия – данные МОЦА, квадраты – восстановленные значения). Звездочкой отмечена точка среднегодового содержания  $\delta\text{HDO}$  в приземном слое по данным модели ECHAM4 [3] для  $65^\circ$  с.ш.

## Заключение

Нами разработан метод восстановления вертикальных профилей  $\delta\text{HDO}$  в атмосфере с использованием сжатия спектров пропускания атмосферы и априорной информации в виде вертикальных профилей  $\delta\text{HDO}$  из модели общей циркуляции атмосферы, учитывающей изотопное разделение воды. Построение линейной регрессии между главными компонентами профилей  $\delta\text{HDO}$  и спектров пропускания атмосферы позволяет относительно быстро получать как профиль, так и полное содержание отношения  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  в атмосферном столбе из измеренного спектра высокого разрешения приборами FTIR наземного базирования. Анализ ошибок с помощью замкнутых вычислений демонстрирует удовлетворительную точность разработанного метода линейной регрессии при восстановлении профиля  $\delta\text{HDO}$  и хорошую точность при восстановлении  $\delta\text{HDO}^*$ . Однако это – оценка ошибки снизу, так как это ошибка непосредственно в самой схеме регрессии без учета неопределенностей, связанных с ошибками спектроскопических данных в базе данных HITRAN.

Предложенный метод был апробирован на выборочных спектрах пропускания атмосферы, измеренных прибором FTIR в условиях чистого неба и сопровождающихся одновременными зондовыми измерениями профилей температуры и влажности. Результаты, полученные для восстановленных профилей и относительного содержания  $\delta\text{HDO}$  в столбе, сравниваются с данными МОЦА для исследуемого географического региона (см. рис. 4).

Наблюдаются систематические отличия восстановленных из спектров FTIR и модельных данных  $\delta\text{HDO}$  и  $\delta\text{HDO}^*$ . Одна из возможных причин такого отличия – это неточность значений коэффициентов уширения линий HDO для спектрального интервала 1205–1207  $\text{cm}^{-1}$ , имеющихся в базе данных HITRAN. Более точные данные по коэффициентам уширения линий HDO в указанном спектральном интервале необходимы для увеличения точности предложенного метода определения вертикального профиля  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  из спектров пропускания атмосферы высокого разрешения.

Использование предложенной методологии позволило бы получить представительные временные ряды изменения величины  $\delta\text{HDO}$  на различных высотах атмосферы благодаря данным наземной квазиглобальной сети FTIR, покрывающей широты от 77,81° ю.ш. до 78,91° с.ш. [19].

1. Jouzel J., Koster R.D., Suozzo R.J., Russell G.L., White J.W.C., Broecker W.S. Simulations of the HDO and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  atmospheric cycles using the NASA giss general-circulation model-sensitivity experiments for present-day conditions // *J. Geophys. Res.* 1991. V. 96. P. 7495–7507.
2. Koster R.D., Valpine D.P., Jouzel J. Continental water recycling and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  concentrations // *Geophys. Res. Lett.* 1993. V. 20. P. 2215–2218.

Определение вертикального профиля  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  из спектров пропускания атмосферы высокого разрешения 251  
7. Оптика атмосферы и океана, № 3.

3. Hoffmann G., Werner M., Heimann M. Water isotope module of the ECHAM atmospheric general circulation model: A study on timescales from days to several years // *J. Geophys. Res.* 1998. V. 103. P. 16,871–16,896.
4. Jouzel J., Hoffmann G., Koster R.D., Masson V. Water isotopes in precipitation: data/model comparison for present-day and past climates // *Quatern. Sci. Rev.* 2000. V. 19. P. 363–379.
5. Bosilovich M. G., Schubert S. D. Water vapor tracers as diagnostics of the regional hydrologic cycle // *J. of Hydrometeorol.* 2002. N 3. P. 149–165.
6. Noone D., Simmonds I. Annular variations in moisture transport mechanisms and the abundance of  $\delta^{18}\text{O}$  in Antarctic snow // *J. Geophys. Res. A.* 2002. V. 107. 4742, doi:10.1029/2002JD002262.
7. Hendricks M.B., DePaolo D.J., Cohen R.C. Space and time variation of delta O-18 and delta D in precipitation: Can paleotemperature be estimated from ice cores? // *Global Biogeochem. Cycles.* 2000. N 14. P. 851–861.
8. Dansgaard W. Stable isotopes in precipitations // *Tellus.* 1964. V. XVI. N 4. P. 436–468.
9. Seki K., Kasai Y., Murayama Y., Mizutani K., Itabe T., Frank J.M., William R.S., Steven A.L. Trace Gas Observation with Poker Flat FTIR // *J. Commun. Res. Lab.* 2002. V. 49. N 2. P. 191–200.
10. Kasai Y.J., Kagawa A., Jones N., Fujiwara A., Seki K., Murayama Y., Murcay F. Seasonal Variations of CO and HCN in the Troposphere Measured by Solar Absorption Spectroscopy Over Poker Flat, Alaska // *Geophys. Res. Lett.* 2005. V. 32. L19812, doi:10.1029/2005GL022826.
11. Kasai Y.J., Koshiro T., Endo M., Jones N.B., Murayama Y. Ground-based measurement of stratospheric CO by a FTIR spectrometer over Poker Flat, Alaska // *Adv. in Space Res.* 2005. V. 35. N 11. P. 2024–2030.
12. Schmidt G.A., Hoffmann G., Shindell D.T., Hu Y. Modelling atmospheric stable water isotopes and the potential for constraining cloud processes and stratosphere-troposphere water exchange // *J. Geophys. Res.* 2005. V. 110. D21314, doi:10.1029/2005JD005790.
13. Тимофеев Ю.М., Васильев А.В. Теоретические основы атмосферной оптики. СПб.: Наука, 2003. 474 с.
14. Liou K.N. An Introduction to Atmospheric Radiation. Academic Press, 2002. 583 p.
15. Rothman L.S. et al. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN atmospheric workstation): 1996 edition // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1998. V. 60. P. 665–710.
16. Rothman et al. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2005. V. 96. P. 139–204.
17. Gribanov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A., Tyuterev Vl.G. A New Software Tool for Radiative Transfer Calculations and its application to IMG/ADEOS data // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2001. V. 68. N 4. P. 435–451.
18. Notholt J., Schrems O. Ground-based FTIR measurements of vertical column densities of several trace gases above Spitzbergen // *Geophys. Res. Lett.* 1994. V. 21. P. 1355–1358.
19. Dils B. et al. Comparisons between SCIAMACHY and ground-based FTIR data for total columns of CO,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$  and  $\text{N}_2\text{O}$  // *Atmos. Chem. Phys.* 2006. N 6. P. 1953–1976.
20. Rogers C.D. Characterization and Error Analysis of Profiles Retrieved from Remote Sounding Measurements // *J. Geophys. Res.* 1990. V. 95. P. 5587–5597.

21. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Топтыгин А.Ю. Восстановление профилей температуры и влажности по ИК-спектрам Земли на основе сингулярного разложения ковариационных матриц // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 7. С. 576–581.
22. Успенский А.Б., Романов С.В., Троценко А.Н. Применение метода главных компонент для анализа ИК-спектров высокого разрешения, измеренных со спутников // Исслед. Земли из космоса 2003. № 3. Р. 26–33.

*A.Yu. Toptygin, K.G. Gribanov, V.I. Zakharov, Y. Kasai, A. Kagawa, Y. Murayama, R. Imasu, G.A. Schmidt, G. Hoffmann, J. Jouzel. The retrieval of HDO/H<sub>2</sub>O vertical profile in the atmosphere from high resolution transmission spectra.*

In this paper, we present the method of retrieval of HDO/H<sub>2</sub>O in vertical profile using IR transmission spectra from high resolution ground-based Fourier transform infrared spectrometers (FTIR). The regression between Principal Components (PCs) of HDO profiles and PCs of spectra were used to retrieve HDO/H<sub>2</sub>O vertical profile from observed atmospheric transmission spectra. Error estimation of the retrieval scheme was made using closed model computations with synthetic spectra of the FTIR and known sets of HDO/H<sub>2</sub>O profiles, and its value is within 5–65‰ for vertical profile and not greater than 8‰ for columnar value of HDO/H<sub>2</sub>O.

Actual tests of the presented method were made on a few samples of IR transmission spectra observed by FTIR (Alaska) from 2000 to 2004. Obtained HDO/H<sub>2</sub>O values are compared with isotopic Atmospheric General Circulation Model (AGCM) outputs for Alaska's atmosphere.