**Мануал к модели**

Данная модель представляет собой простую изотопную модель рэлеевской дистилляции, которая считает изотопный состав (18O, D и 17O) атмосферных осадков. Модель умеет решать прямую задачу (по заданным начальным условиям считать изотопный состав осадков) и обратную задачу (с помощью метода Монте Карло подбирать такие значения начальных условий, которые могли сформировать наблюдаемый изотопный состав осадков).

Модель написана с использованием пакета Matlab R2021b.

При использовании модели просьба ссылаться на работу:

Екайкин А.А. Усовершенствованная модель формирования изотопного состава осадков в Центральной Антарктиде, включающая геохимический цикл кислорода 17 – Лёд и снег, 2024, вып. 1, в печати.

**Для начала работы** следует открыть файл “SIM2023.mlx”, в командной строке вызвать SIM2023 и дальше следовать указаниям:

В первую очередь модель предложит выбрать какую задачу надо решить – прямую (1) или обратную (2).

Если выбрана прямая задача:

модель предложит открыть файл InputSIM2023.xlsx и ввести там необходимые параметры. О работе с этим файлом см. ниже;

далее модель предложит выбрать как учитывать влажность воздуха в источнике влаги – как независимый параметр (1) или как линейную функцию температуры (2).

После нажатия Enter модель начнет расчет, выдаст результат в виде файла SIMresults.xlsx и построит несколько графиков (зависимость 18O от температуры вдоль траектории, линию метеорных вод, зависимость эксцесса дейтерия (по линейному (dxs) и по логарифмическому (dln) уравнению) от 18O и зависимость 17O-excess 18O).

Если выбрана обратная задача:

модель предложит открыть файл InputSIM2023range.xlsx и ввести там необходимые параметры. О работе с этим файлом см. ниже;

далее модель предложит выбрать как учитывать влажность воздуха в источнике влаги – как независимый параметр (1) или как линейную функцию температуры (2);

затем модель предложит выбрать по каким целевым показателям настраивать параметры: по 18O (1), D (2), по D и dxs (3), по D, dxs и 17O-excess (4), по D, dln и 17O-excess, и по D, dxs и 17O-excess плюс пространственные градиенты изотопного состава для твердых осадков (6). Последняя опция нужна для настройки модели к условиям центральной Антарктиды;

дальше модель предложит ввести необходимый объем выборки (количество попаданий в целевые показатели).

После этого модель выведет на экран оценку максимального времени расчета (по умолчанию указано максимальное количество расчетов 100000 – после этого модель перестанет считать, даже если не наберет нужный объем выборки) и после нажатия Enter начет считать. Результаты записываются в файл SIM\_MC\_results.xlsx.

**Ввод данных в файле InputSIM2023.xlsx**

**NB!:**

Файл не следует видоизменять, вставлять или убирать строки и ячейки и т.д. Данные вводить только в ячейки, отмеченные зелёным, красные не трогать.

Входные параметры состоят из нескольких блоков:

1. Условия с источнике влаги: температура поверхности моря, относительная влажность (в долях единицы, от 0 до 1), кинетические факторы k (см. статью с подробным описанием), изотопный состав морской воды, «циркуляционные параметры» (см. статью), и коэффициенты для расчета влажности как функции температуры.

2. Равновесные коэффициенты фракционирования. Тут нельзя вставлять произвольные значения – вместо этого в зелёном поле надо выбрать данные по какому источнику следует использовать (Majoube71 и т.д.). Тут же показатель степени n, в которую нужно возвести равновесный к-т фракционирования для кислорода 18, чтобы получить к-т для кислорода 17.

3. Параметры траектории – длина, высота, кривизна, вертикальный градиент температуры, температура конденсации в конце траектории и приземное давление воздуха в начале траектории.

4. Осадкообразование в облаках – параметры L0 (содержание жидкой влаги в жидких облаках), Nu (потеря влаги в смешанных облаках за счет выпадения и испарения), sigma0 (один из основных параметров для твердых осадков, который характеризует степень перенасыщения воздуха влагой надо льдом), а также температуры перехода от жидких к смешанным и от смешанных к твердым осадкам.

5. Коэффициенты для расчета давления насыщения водяных паров над водой и надо льдом.

6. Коэффициенты диффузии молекул воды в воздухе.

**Ввод данных в файле InputSIM2023range.xlsx**

В основе тут то же самое, что и в файле **InputSIM2023.xlsx**, но для каждого параметра вводится не одно значение, а два, которые задают минимальный и максимальный пределы интервала, из которого модель случайным образом выбирает значения.

Исключения – коэффициенты фракционирования; длина и высота траектории, давление на уровне моря (они задаются постоянными), коэффициенты для расчеты давления насыщения водяных паров и коэффициентов диффузии.

Также тут добавляется еще один блок, в котором задаются целевые параметры: 18O, D, dxs и dln задаются как среднее ± допуск, а также градиенты D/T, dxs/d и 17O-excess/D как среднее ± процент отклонения от среднего.

**Файлы с результатами:**

**SIMresults.xlsx**

Файл организован таким образом:

в колонках – разные параметры, в строчках – изменения этих параметров вдоль траектории:

колонка А – расстояние (км);

колонка B – высота над у.м. (м);

колонка С – температура конденсации (\*С);

колонка D – давление, Па;

колонки E-G – изотопный состав водяного пара (‰). В начале идут 0, это значит, что при этой температуре осадки еще не начались.

Колонки H-M – изотопный состав осадков.

**NB!:** После работы с файлом **SIMresults.xlsx** его надо закрыть (и лучше удалить) перед следующим запуском программы.

**SIM\_MC\_results.xlsx**

Файл организован таким образом:

В колонках приведены разные параметры, в строчках – значения этих параметров для разных реализаций модели (приводятся только результаты тех расчетов, которые попали в целевые параметры):

колонка А – температура поверхности океана в источнике влаги (\*С);

колонка B – относительная влажность воздуха в источнике влаги (в долях единицы);

колонки С-Е – кинетические факторы при испарении влаги;

колонки F-H – изотопный состав морской воды (‰);

колонки I-K – «циркуляционные параметры»;

L – значение n;

M – кривизна траектории;

N – вертикальный градиент температуры;

O – температура конденсации;

P – параметр L0;

Q – параметр Nu;

R – параметр sigma0;

S – параметр T\_w;

T – параметр T\_i;

V-W – коэффициенты диффузии;

Дальше идут значения изотопного состава осадков. Набор параметров тут будет зависеть от того, какие целевые параметры были выбраны. При выборе варианта (4) (по D, dxs и 17O-excess) тут также будут приведены значения изотопного состава начального водяного пара в источнике влаги.

**NB!:** После работы с файлом **SIM\_MC\_results.xlsx** его надо закрыть (и лучше удалить) перед следующим запуском программы.