

Ф. Шрейер, У. Боттгер

Line-by-line код для вычислений инфракрасного атмосферного излучения, включая производные

Технологический институт дистанционного зондирования, г. Оберпфaffenхофен, Германия

Поступила в редакцию 13.01.2003 г.

Комплект программ MIRART (молекулярное инфракрасное атмосферное излучение и пропускание) для вычислений с высоким разрешением и переноса инфракрасного излучения в атмосфере был создан с акцентом на эффективность и надежность численных алгоритмов и модульный подход, удобный для прямых вычислений и(или) восстановления спектров в различных приложениях. Этот код был тщательно проверен. Молекулярные весовые функции получены с помощью автоматического дифференцирования.

Введение

В последние годы широкое использование спектров высокого разрешения для атмосферных дистанционных измерений: наземных, на борту самолета или на космическом корабле, дает благодатную почву для развития line-by-line (LbL) моделирования переноса излучения. Например, наш институт работает и с инфракрасным гетеродинамическим спектрометром в ИК-диапазоне [1] и с Фурье-спектрометром в дальнем ИК-диапазоне, базирующимся на борту самолета [2], и с наземными измерениями атмосферных газов, и со струей выходящего газа из реактивного двигателя [3]. Комбинированная установка Фурье-спектрометра и графический спектрометр находятся сейчас в процессе доводки для наблюдений высокотемпературных явлений с борта самолета (жестких пламен, вулканов и т.д. [4]).

Существенной предпосылкой для анализа спектров высокого разрешения, а также для теоретических исследований, таких как восстановление спектров, является гибкая и эффективная информация о переносе излучения, поскольку восстановление атмосферных параметров представляет собой, в основном, нелинейную задачу оптимизации (обратная задача), а качество восстановленной информации тесно связано с информацией по переносу излучения (прямая задача).

Возросший интерес к исследованиям в направлении увеличения компьютерных мощностей оказал большое влияние на создание и развитие программ расчета переноса излучения в атмосфере. К тому же в последние 10 лет были созданы различные LbL программы с нетривиальными алгоритмами восстановления. Более того, производные по неизвестным профилям обычно недоступны либо их очень трудно считать.

1. Теоретические основы переноса инфракрасного излучения в атмосфере

Интенсивность излучения I с волновым числом ν , полученная в эксперименте в позиции $s = 0$, может быть записана в виде интеграла (в пренебрежении рассеянием и в термодинамическом равновесии)

$$I(\nu) = I_{\infty}(\nu) \tau(\nu; \infty) - \int_0^{\infty} ds' B[\nu, T(s')] \frac{\partial \tau(\nu; s')}{\partial s'}, \quad (1)$$

где I_{∞} – фоновое излучение (т.е. излучение с поверхности Земли для установок нижнего обзора); B – функция Планка при температуре T :

$$B(\nu, T) = 2hc^2\nu^3 / [\exp(hc\nu/k_B T) - 1], \quad (2)$$

где c, h, k_B – скорость света, постоянная Планка и постоянная Больцмана соответственно. Прохождение монохроматического света τ записывается согласно закону Бэра

$$\tau(\nu; s) = \exp \left[- \int_0^s \alpha(\nu, s') ds' \right], \quad (3)$$

$$\alpha(\nu; s) = \sum_m k_m[\nu, p(s), T(s)] n_m(s) + \alpha^{(c)}(\nu, s), \quad (4)$$

где α – объемный коэффициент поглощения; k_m, n_m – сечения поглощения и плотность m молекул; $\alpha^{(c)}$ – коэффициент континуального поглощения. Инструментальные эффекты учитывались по методу свертки соответствующих экспериментальных контуров линий (ILS – Instrumental Line Shape) и функции поля зрения (FoV – Field of View).

В основном молекулярные сечения поглощения получены суммированием вкладов многих линий $k_m = \sum_l k_m^{(l)}$.

Для отдельной линии сечение поглощения является произведением коэффициента температурной зависимости силы линии $S(T)$ и нормализованной функции контура линии $g(\nu)$, описывающей механизм уширения:

$$k(\nu, s) = S[T(s)] g[\nu, p(s), T(s)]. \quad (5)$$

В атмосфере комбинированный эффект уширения линии давлением (полуширина пропорциональна давлению, $\gamma_L \sim p$), соответствующий лоренцевскому контуру линии

$$g_L(\nu) = \frac{\gamma_L/\pi}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2}, \quad (6)$$

и доплеровскому уширению, соответствующему гауссовскому контуру линии

$$g_D(\nu) = \frac{1}{\gamma_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-\ln 2 \left(\frac{\nu - \nu_0}{\gamma_D} \right)^2 \right], \quad (7)$$

с $\gamma_D \sim \nu_0 \sqrt{T}$ может быть представлен фойгтовским контуром линии $g_I(\nu) = g_L \otimes g_D$.

2. Численные аспекты

Применяемая в различных приложениях MIRART сконструирована для наблюдения произвольной геометрии FoV и ILS. В следующих разделах обсуждаются ее различные особенности.

2.1. Функция Фойгта

Интеграл свертки, определяющий фойгтовский контур

$$g_I(\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2/\pi}}{\gamma_D} K(x, y), \quad (8)$$

$$K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(x-t)^2 + y^2} dt, \quad (9)$$

невозможно выразить в замкнутой форме, но можно решить численно. Большинство современных алгоритмов зависят от приближений комплексной функции ошибок $w(z)$, реальная часть которой представляет функцию Фойгта $K(x, y) = \Re[w(x + iy)]$. Безразмерные переменные x , y определяются расстоянием от центра линии ν_0 до лоренцевской и доплеровской полуширин, $x = \sqrt{\ln 2} (\nu - \nu_0)/\gamma_D$, $y = \sqrt{\ln 2} \gamma_L/\gamma_D$ соответственно. В настоящее время известны рациональные аппроксиманты, дающие точные и эффективные алгоритмы численного расчета широкого класса функций. Для вычисления комплексной функции ошибок в MIRART используется оптимальная комбинация [8] алгоритмов, разработанная авторами [9, 10].

2.2. Молекулярные сечения поглощения

Line-by-line вычисления сечений поглощения занимают наибольшее время в вычислениях переноса излучения в атмосфере. В настоящий момент развито много схем оптимизации этого процесса, см., например, [5, 6, 11, 12]. В MIRART сетка по волновым числам выбирается конкретно для каждой высоты и молекулы. Кроме того, используются грубая сетка для учета вкладов от линий, находящихся вне исследуемого спектрального диапазона, и уточненная спектральная сетка для учета вкладов от центров линий.

Молекулярные сечения поглощения вычислены с использованием спектроскопических данных из баз данных HITRAN [13], HITEMP [14], GEISA [15] и JPL [16]. В дополнение к вкладам от центров линий вычислен также вклад континуума для молекул воды, двуокиси углерода и азота [17, 18].

2.3. Температурная зависимость сил линий

Переход от температуры T_0 (т.е. температуры, взятой из баз данных спектроскопических параметров линий) в формуле для силы линий к естественной температуре T , вычисленной в соответствии со схемой, использованной в ATMOS [19], выглядит следующим образом:

$$S(T) = S(T_0) \frac{Q(T_0) \exp(-E_i/kT) 1 - \exp(-h\nu_0/kT)}{Q(T) \exp(-E_i/kT_0) 1 - \exp(-h\nu_0/kT_0)}. \quad (10)$$

Здесь $Q(T)$ – произведение колебательной и вращательной частичных функций, $Q = Q_{\text{rot}} Q_{\text{vib}}$ с

$$Q_{\text{rot}}(T) = Q_{\text{rot}}(T_0) (T/T_0)^\beta, \quad (11)$$

$$Q_{\text{vib}}(T) = \prod_{i=1}^N [1 - \exp(-h\nu_i/kT)]^{-d_i}, \quad (12)$$

где β – температурный коэффициент вращательной частичной функции; N – количество колебательных мод с волновым числом ν_i и вырождением d_i .

2.4. Интеграл по траектории

Для решения уравнения Шварцшильда (1) согласно закону Бэра (3) необходимо интегрировать по пространственным переменным (заданным для дискретных точек по высоте) вдоль линии визирования. Стандартный подход состоит в том, чтобы разделить атмосферу на множество однородных слоев со «средней» температурой, давлением и концентрацией. С использованием приближения Куртиса–Годзона общее пропускание выражается через произведение пропусканий всех слоев, а излучение вычисляется рекурсивно.

Интегралы в (1) и (3) могут быть вычислены по стандартным правилам интегрирования. Например, при использовании n -точечного приближения, оптическая толщина в (3) выражается следующим образом:

$$\tau = \int_{s_b}^{s_a} \alpha(s) ds = \sum_j w_j \alpha(s_j), \quad (13)$$

где веса w_j и узловые точки s_j определяются согласно выбранному правилу интегрирования. В MIRAS используется метод трапеций, метод перекрывающихся парабол [20] или интеграл по кусочным кубичным полиномам Эрмита (PCHIP) [21] (рис. 1). На рис. 1 увеличенный фрагмент показывает увеличение для ОН-триплетта, здесь не видна очень слабая третья линия триплетта. Время вычисления интегралов по частичным кубичным полиномам значительно больше, нежели по методу трапеций или перекрывающихся парабол. Заметим, что этот метод интегрирования работает для произвольного s . Для наклонных трасс с углом в зените ν к плоскости наблюдения, точки на сетке по высоте z_j и точки на сетке по пути s_j различаются только фактором $\cos(\nu)$. Для лимбовых трасс разметка атмосферных профилей зависит от расстояния s до линии визирования, т.е. $T(s) = T[z(s)]$ и т.д.

2.5. Оптимизация метода перекрывающихся парабол

Для вычисления по методу перекрывающихся парабол в MIRART используется процедура AVINT библио-

теки SLATEC [22]. В общем (см. рис. 1) видно хорошее согласие спектров, полученных с помощью AVINT и РСНIP, в то время как спектры, вычисленные по методу трапеций, несколько отличаются от предыдущих. С другой стороны, быстродействие метода трапеций гораздо выше, нежели AVINT и РСНIP.

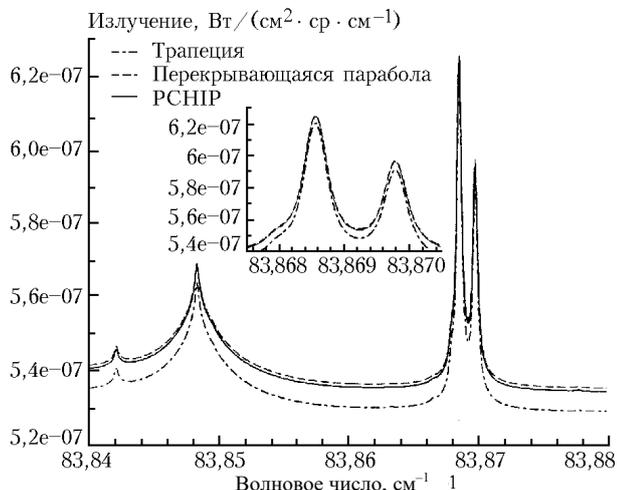


Рис. 1. Сравнение спектров в далеком инфракрасном диапазоне вблизи триплета ОН (при $83,869 \text{ см}^{-1}$), полученных с различными правилами интегрирования: лимбовый путь при 50 км, касательный при 20 км. H_2O , O_3 , OH , HO_2 , эмпирический FIRS-континуум. Фойгтовский контур линии с обрывом в 2 см^{-1} от центра линии. Большие отклонения около $83,848 \text{ см}^{-1}$ происходят благодаря озону

Однако относительная простота метода перекрывающихся парабол упрощает процесс оптимизации программы, дающий на выходе алгоритм ускоренного расчета, не уступающий по скорости методу трапеций. Отметим, что даже некоторые преобразования исходной программы дают увеличение скорости счета: замена конструкций IF на DO, удаление неопределенностей при делении и пропуск повторяющихся проверок входных данных.

Вычисление интенсивности (1) требует знания коэффициента пропускания $\tau(v, s')$, являющегося функцией от расстояния до наблюдаемой s' , т.е. для всех точек s_j траектории между регистрирующим устройством и конечной точкой. В этом случае веса w_j могут быть вычислены единожды, а последующие интегралы от фиксированной начальной точки до последовательностей конечных точек s_j могут быть записаны в виде матрично-векторных произведений.

2.6. Реализация

Данная версия MIRART написана на Fortran-77 с использованием некоторых расширений из Fortran-90 и открытых математических библиотек, таких как SLATC [22] и BLAS [23].

Выполнение программы контролируется процедурой Nemelist, допускающей свободный формат входных данных. Все данные, за исключением некоторых фундаментальных констант (например, π и т.п.) считываются из внешних файлов. Молекулярные параметры, такие как масса молекулы, колебательные частоты и т.д., также считываются из внешнего файла, что позволяет вносить данные «новых» молекул без перекомпиляции программы.

3. Тестирование программы

Одним из самых важных и трудоемких этапов в разработке программ является тестирование. К сожалению, в настоящий момент не существует конечного решения (в аналитическом виде) задачи о переносе излучения в атмосфере в реальных условиях и как следствие – не с чем сравнивать расчетные данные. Полное тестирование кода, на аналитических результатах, является обязательным для промежуточных результатов, таких как сечения поглощения, но, очевидно, это не влияет на код программы. Сравнение расчетных спектров с экспериментальными достаточно затруднительно в силу неполных знаний об атмосфере и неточных спектроскопических параметров. Таким образом, данный подход существенным образом ограничен лабораторными измерениями для однородных газовых смесей, т.е. он не позволяет корректировать численные решения интегралов по траекториям в выражениях (1) и (3).

Стандартный подход проверки LbL кода основывается на перекрестном тестировании сходных данных. Недавно MIRART использовался в двух расширенных тестах.

3.1. Улучшенный алгоритм анализа данных 2-го уровня MIPAS (AMIL2DA)

Для того чтобы оценить непротиворечивость данных второго уровня, полученных из измерений на лимбовом Фурье-спектрометре MIPAS, установленном на борту спутника, был организован проект AMIL2DA. Этот проект также имел целью тщательно сравнить и охарактеризовать алгоритмы и стратегии анализа данных, используемых различными европейскими группами. Важнейшим шагом в этом проекте являлся выбор наилучшей модели переноса излучения в атмосфере для использования ее в MIPAS [24]. Сравнение лучших моделей было организовано в виде серий задач, начиная с самых простых задач для установочных параметров, проверяющих функциональность и действенность алгоритмов, и кончая реальными сценариями. В рамках первой серии задач рассматривалось пропускание одиночной линии N_2O для различных давлений и температур. Проверялось вычисление контура линии и силы линии. Во второй серии задач сравнивались спектры излучения для лимбовой геометрии с экспериментальными эффектами. На рис. 2 показано сравнение с лимбовым спектром, отклонения в пределах 1%.

3.2. Международный симпозиум по моделированию прохождения излучения через атмосферу 2001 г. (IRTMW01)

Основным объектом исследования на IRTMW01 было сравнение различных программ расчета переноса излучения в микроволновом диапазоне [25]. Подобно проекту AMIL2DA сравнения были организованы в серию значительно усложненных задач, начиная с оценки фойгтовского контура линии и вычислений коэффициентов молекулярного поглощения. Как и для соответствующих задач в AMIL2DA, в MIRART появляются некоторые отклонения в спектрах при температурах, отличных от приведенных в базах данных, что было приписано использованию различных методов преобразования сил линий.

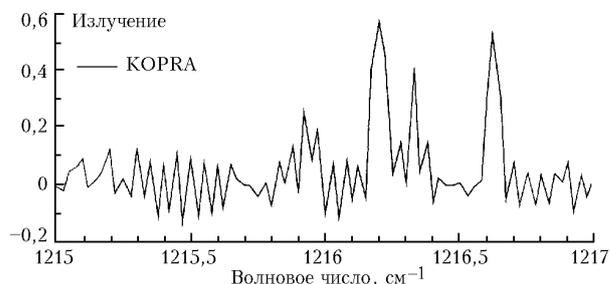
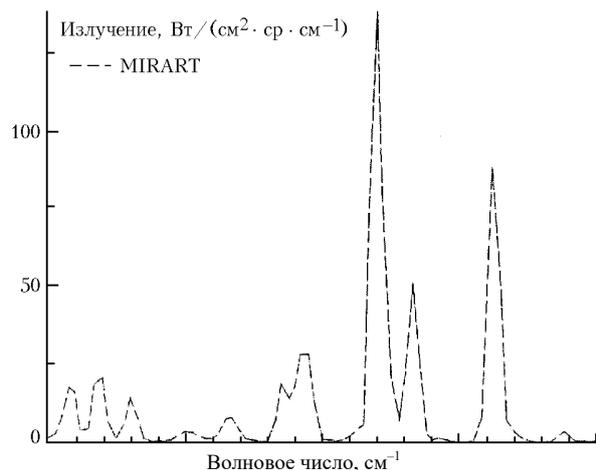


Рис. 2. Сравнение в рамках AMIL2DA: KOPRA line-by-line код [31] и MIRART. Лимбовое визирование с касательной на высоте 40 км, функция аподизации, конечное поле зрения, H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O ; CKD-континуум [5]

Целью третьего набора программ была проверка правильности выполнения алгоритма расчета переноса излучения, т.е. вычисление интегралов в уравнениях (1) и (3). Для того чтобы можно было уловить различные источники возможных отклонений между моделями, коэффициенты поглощения $\alpha(\nu, z)$ были заранее вычислены группой ученых Бременского университета и использовались как общие входные данные. На четвертом шаге тестировалась вся цепочка, включая LbL-вычисления, континуальные поправки и интегралы по траекториям. Геометрия задачи и инструментальные параметры были идентичны третьему шагу. Таким образом, изменения спек-

тров от третьего к четвертому набору задач возникают из-за различий во входных данных или из-за разных вычисленных значений поперечных сечений и коэффициентов поглощения.

Сравнения проводились для различных геометрий и для идеальных монохроматических спектров, а также для сверток спектров ILS и FoV. На рис. 3 показаны результаты зондирования по направлению вверх: в то время как в третьем блоке задачи спектры не дают видимых отличий, в четвертом блоке возникают легкие отличия для малых зенитных углов. Подобные результаты были получены для третьего и четвертого блоков задач при зондировании по направлению вниз и лимбовом визировании.

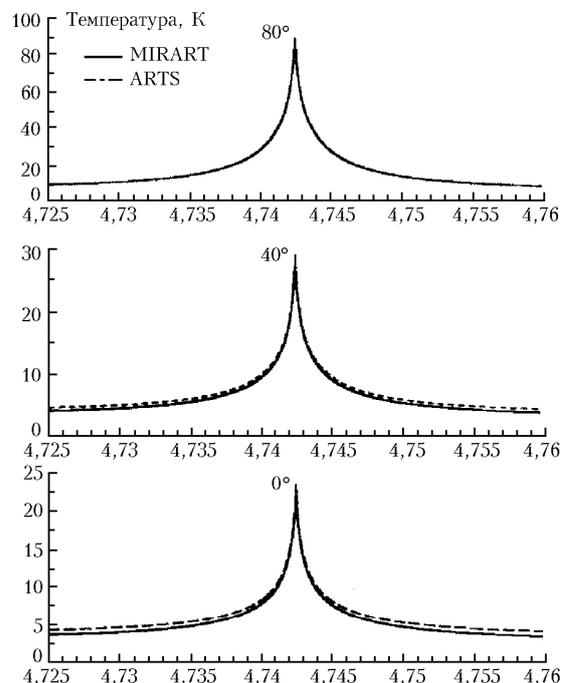
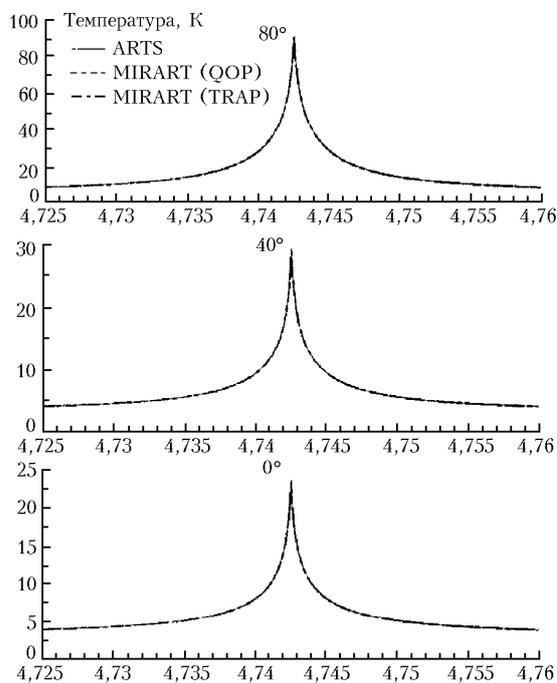


Рис. 3. Сравнение в рамках IRTMW01 (третий блок задач – слева и четвертый – справа) зондирования вверх: ARTS line-by-line код (Бременский университет) в MIRART. «QOP» и «TRAP» означают метод перекрывающихся парабол и метод трапеций. O_3 и O_2 , совершенная антенна (т.е. инфинитоземельная FoV), приемник с выделенной боковой полосой с гауссовой ILS-функцией и полушириной 0,25 МГц

4. Весовые функции

Дистанционное зондирование атмосферы с помощью спектроскопии высокого решения в настоящее время хо-

рошо отработано технически и позволяет определять температуру, давление и составляющие профилей с помощью инверсного уравнения переноса излучения (обратная задача). Поскольку соотношение между неизвест-

ным профилем и спектром (уравнения (1) и (3)) не линейно, обратная задача может быть дополнена ньютоновским интегрированием, основанным на линеаризации. Во многих случаях различие в вычислении якобиана или «весовых функций» выполняется с помощью численного дифференцирования конечных разностей и, таким образом, часто составляет основную часть восстановления. Более того, соответствующую величину возмущения очень трудно предсказать [26].

В данном случае предпочтительны аналитические методы вычисления весовой функции ввиду их эффективности и точности. Однако вычисление производных вручную и подстановку их в программный код утомительно и чреваты ошибками.

Автоматическое дифференцирование является хорошей альтернативой аналитическим вычислениям для получения быстро генерируемого компьютерного кода расчета производных. Техника автоматического дифференцирования [27, 28] основана на том факте, что каждая модель, реализованная в виде программы, в основном сформулирована на языке элементарных операторов (сумма, произведение, степень) и элементарных функций. В противоположность интегрированию дифференцирование основано на нескольких простых рецептах, таких как цепное правило, и может быть проведено автоматически любым прекомпилятором, для которого компьютерный код (программа) является входными данными. В настоящее время существует множество процедур дифференцирования, написанных на различных языках программирования (Fortran, C, ...). Мы использовали систему ADIFOR [29], написанную на языке Fortran-77.

На первом этапе определялась функция, которую нужно продифференцировать. Функции Якоби, необходимые для решения обратных задач в атмосферной оптике нелинейным методом наименьших квадратов, есть не что иное, как производные вектора излучения по дискретному представлению (вектор) атмосферного профиля. Поскольку методом наименьших квадратов минимизируется разность между экспериментальным и вычисленным спектрами, в модель были также включены инструментальные эффекты.

«Программы высокого уровня» позволяют дифференцировать и вычислять интегралы по траекториям, а также интеграл свертки монохроматического спектра с ILS и FoV. Кроме того, независимые (здесь молекулярная концентрация) и зависимые (экспериментально измеренное излучение) переменные в функции относительно дифференцирования могут быть изменены. Поскольку в Fortran-77 не допускается динамического перераспределения памяти, для ADIFOR требуется определить верхнюю границу по размеру градиента объекта, которая может быть приравнена максимальному числу уровней высоты, используемому для атмосферных профилей. Эта информация собрана в скрипте ADIFOR, как показано на рис. 4.

```
AD_TOP      = schwarzschild_ils_fov
AD_IVARS    = Density
AD_DVARS    = Radiance
AD_PMAX     = 50
```

Рис. 4. ADIFOR-скрипт, используемый в MIRART для весовых функций молекулярной концентрации

Следующий шаг состоит в том, чтобы сгенерировать «композиционный файл», т.е. распечатку всех исходных файлов, составляющих программу (рис. 5). Эта распечатка в основном состоит из головной программы и всех подпрограмм, называемых подпрограммами верхнего уровня и включающих полный код, необходимый для определения зависимых переменных как функций независимых переменных. Это не обязательно для представления полного кода в ADIFOR. В случае молекулярных весовых функций часть с LbL не нужна и может быть опущена. Также нет необходимости включать LbL в основную программу. Основная программа содержит только вызовы подпрограмм высокого уровня и соответствующие декларации.

```
dummy_main.f
schwarzschild_ils_fov.
schwarzschild.f
convolve_ils.f
convolve_fov.f
.....
```

Рис. 5. Отрывок файла ADIFOR, используемый для весовых функций MIRART (заметим, что эта выдержка чисто иллюстративная и имена не соответствуют реальным файлам; в действительности наш композиционный файл содержит более 100 процедур)

Команда ADIFOR теперь генерирует вторичный код для подпрограмм верхнего уровня и для всех подпрограмм, прямо или косвенно связанных с ними. Заметим, что в новом коде операторы, включающие независимые, зависимые и промежуточные переменные, дополнены соответствующими операторами, вычисляющими производные. Таким образом, список аргументов всех дополнительных подпрограмм будет расширен произвольными переменными и основная программа, вызывающая подпрограммы верхнего уровня, будет автоматически изменена. Более того, вводится так называемая затравочная матрица, показывающая, относительно каких элементов вектора (или матрицы) вычисляется производная. В конце концов новые подпрограммы собираются в один модуль, линкуются и компилируются.

На рис. 6 представлены весовые функции H₂O лимбового визирования, вычисленные по усиленному методу автоматических производных. Они проверялись по методу конечных разностей. Это выявляет проблему выбора возмущений для конечно разностных аппроксимаций. Время вычисления для лимбовой последовательности интенсивностей и якобианов увеличивается втрое по сравнению с прямым вычислением, т.е. налицо значительный выигрыш по времени вычисления по сравнению с конечными разностями для якобиана с 20 колонками.

5. Дальнейшие исследования

Код программы MIRART (молекулярное инфракрасное атмосферное излучение и прохождение) для вычислений переноса излучения в атмосфере представлен с учетом его применения в вычислениях. В частности, автоматическое дифференцирование было использовано, чтобы сгенерировать код для вычисления точных молекулярных весовых функций. Данная работа сосредоточена на применении производных по новым перемен-

ным (например, температура) и интегрировании в «Virtual Lab» [30].

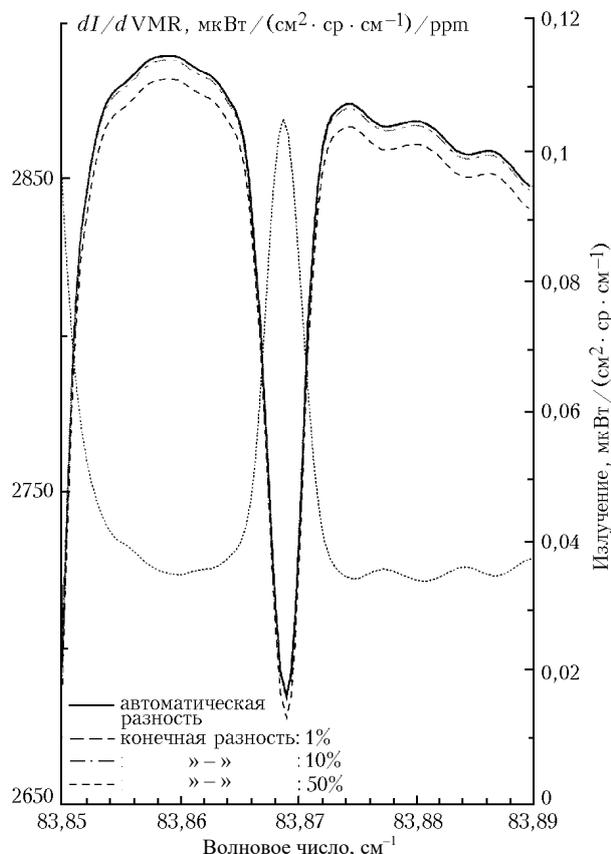


Рис. 6. Сравнение якобианов для H_2O при 25 км, вычисленных автоматическим дифференцированием и с помощью конечных разностей. Лимбовое визирование при 25 км; H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O ; СКД-континуум; параметры линий взяты из базы данных SAO. Гауссиан FoV с полушириной 1 км. FTS с MOPD = 300 см, промежуточная аподизация Нортон-Бира. Пунктирная кривая показывает интенсивность $I(\nu)$; сильный выброс при $83,87 \text{ см}^{-1}$ появляется из-за ОН-триплета (см. рис. 1)

Авторы выражают слова признательности А. Дойку, М. Хесс и Дж. Мендрокку за плодотворные дискуссии. AMIL2DA является свободно распространяемой программой в рамках проекта RTD пятой программы FP EESD Европейской комиссии, проект № EVG1-CT-1999-00015.

1. Englert C., Schimpf B., Birk M., Schreier F., Krocka M., Nitsche R.G., Titz R.U., and Summers M.E. The 2.5 THz heterodyne spectrometer THOMAS: Measurement of OH in the middle atmosphere and comparison with photochemical model results. *J. Geophys. Res.*, 105:22211–22223, 2000.
2. Birk M., Hausmann D., Schreier F., and Wagner G. High resolution infrared laboratory spectroscopy of atmospheric constituents at DLR / J. Demaison, K. Sarka, and E.A. Cohen, editors, *Spectroscopy from Space*, vol. 20 of NATO Science Series II, p. 219–233. Kluwer Academic Publishers, 2001.
3. Haschberger P. and Lindermeir E. Spectrometric inflight measurement of aircraft exhaust emissions. *J. Geophys. Res.*, 101:25995–26006, 1996.
4. Tank V., Haschberger P., Bochter K., Oertel D., Beier K., Schreier F., Birk M., Lindermeir E., and Wagner G. Spectroscopic measurements from space with the FOCUS sensor system to analyse gas and smoke properties of high temperature events / J. Demaison, K. Sarka, and E.A. Cohen, editors, *Spectroscopy from*

Space, vol. 20 of NATO Science Series II, p. 259–273. Kluwer Academic Publishers, 2001.

5. Clough S.A., Kneizys F.X., Anderson G.P., Shettle E.P., Chetwynd J.H., Abreu L.W., Hall L.A., and Worsham R.D. FASCOD3: spectral simulation / J. Lenoble and J.F. Geleyn, editors, *IRS'88: Current Problems in Atmospheric Radiation*, p. 372–375. A. Deepak Publishing, 1988.
6. Edwards D.P. Atmospheric transmittance and radiance calculations using line-by-line computer models. *Proc. SPIE*, 928:94–116, 1988. *Modelling of the Atmosphere*.
7. Kuo-Nan Liou. *An Introduction to Atmospheric Radiation*. Academic Press, Orlando, 1980.
8. Schreier F. The Voigt and complex error function: A comparison of computational methods. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48:743–762, 1992.
9. Humlicek J. Optimized computation of the Voigt and complex probability function. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 27:437–444, 1982.
10. Hui A.K., Armstrong B.H., and Wray A.A. Rapid computation of the Voigt and complex error functions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 19:509–516, 1978.
11. Fomin B.A. Effective interpolation technique for line-by-line calculation of radiation absorption in gases. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 53:663–669, 1995.
12. Kuntz M. and Höpfner M. Efficient line-by-line calculation of absorption coefficients. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 63:97–114, 1999.
13. Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., McCann A., Gamache R.R., Watson R.B., Yoshino K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Nemtchinov V., and Varanasi P. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (Hitran Atmospheric Workstation): 1996 edition. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 60:665–710, 1998.
14. Rothman L.S., Watson R.B., Gamache R.R., Schroeder J., and McCann A. HITRAN HAWKS and HITEMP high temperature molecular database. *Proc. SPIE*, 2471:105–111, 1995.
15. Jacquinet-Husson H., Arié E., Ballard J., Barbe A., Bjoraker G., Bonnet B., Brown L.R., Camy-Peyret C., Champion J.-P., Chédin A., Chursin A., Clerbaux C., Duxbury G., Flaud J.-M., Fourrié N., Fayt A., Graner G., Gamache R., Goldman A., Golovko V.I., Guelachvili G., Hartmann J.M., Hilico J.C., Hillman J., Lefèvre G., Lellouch E., Mikhailenko S.N., Naumenko O.V., Nemtchinov V., Newham D.A., Nikitin A., Orphal J., Perrin A., Reuter D.C., Rinsland C.P., Rosenmann L., Rothman L.S., Scott N.A., Selby J., Sinita L.N., Sirota J.M., Smith A.M., Smith K.M., Tyuterev V.I.G., Tipping R.H., Urban S., Varanasi P., and Weber M. The 1997 spectroscopic GEISA databank. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 62:205–254, 1999.
16. Pickett H.M., Poynter R.L., Cohen E.A., Delitsky M.L., Pearson J.C., and Müller H.S.P. Submillimeter, millimeter, and microwave spectral line catalog. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 60:883–890, 1998.
17. Clough S.A., Kneizys F.X., and Davies R. Line shape and the water vapor continuum. *Atmos. Res.*, 23:229–241, 1989.
18. Echle G. Study of the retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra. Draft report on task 1: Continuum, ESA Contract 12055/96/NL/CN, 1997.
19. Norton R.H. and Rinsland C.P. ATMOS data processing and science analysis methods. *Appl. Opt.*, 30:389–400, 1991.
20. Davis Ph.J. and Rabinowitz Ph. *Numerical Integration*. Blaisdell Publishing Company, 1967.
21. Kahaner D., Moler C., and Nash S. *Numerical Methods and Software*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989.
22. SLATEC. Common Mathematical Library (Version 4.1). Available from NetLib, <http://www.netlib.org/>, July 1993.
23. Lawson C.L., Hanson R.J., Kincaid D.R., and Krogh F.T. Basic Linear Algebra Subprograms for Fortran usage. *ACM Trans. Math. Soft.*, 5(3):308–323, 1979.
24. Clarmann T., von Höpfner M., Funke B., López-Puertas M., Dudhia A., Jay V., Schreier F., Ridolfi M., Ceccherini S., Ker-

- ridge B.J., Reburn J., and Siddans R. Modeling of atmospheric mid-infrared radiative transfer: The AMIL2DA algorithm intercomparison experiment. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2002. In press.
25. Buehler S., Emde C., Eriksson P., Jiminez C., Kasai Y., Kopp G., Koulev N., Kuhn T., Lemke O., Melsheimer C., Miao J., Murtagh D., Ochiai S., Schreier F., Sreerexha T.R., Takahashi C., Tsujimaru S., Urban J., John V.O., and Verdes C. Intercomparison of radiative transfer models. 2002. manuscript in preparation.
 26. Gill P.E., Murray W., and Wright M.H. *Practical Optimization*. Academic Press, London, UK, 1981.
 27. Griewank A. and Corliss G., editors. *Automatic Differentiation of Algorithms*. SIAM, Philadelphia, PA, 1991.
 28. Griewank A. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
 29. Bischof Ch., Khademi R., Mauer A., and Carle A. Adifor 2.0: Automatic differentiation of Fortran-77 programs. *Computational Science & Engineering*, 3(3):18–32, 1996.
 30. Ernst T., Rother T., Schreier F., Wauer J., and Balzer W. DLR's Virtual Lab: Scientific software just a mouse click away. *Computing in Science & Engineering*, 5 (1), Jan/Feb 2003.
 31. Stiller G.P., Clarmann T., von Funke B., Glatthor N., Hase F., Höpfner M., and Linden A. Sensitivity of trace gas abundances retrievals from infrared limb emission spectra to simplifying approximations in radiative transfer modelling. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 72:249–280, 2002.

F. Schreier and U. Böttger. A line-by-line code for infrared.

A suite of programs MIRART (Modular Infrared Atmospheric Radiance and Transmission) for high resolution infrared atmospheric radiative transfer calculations has been developed with emphasis on efficient and reliable numerical algorithms and a modular approach appropriate for simulation and/or retrieval in a variety of applications. The code has been carefully tested in the framework of two extensive intercomparisons. Molecular weighting functions are implemented by means of automatic differentiation.