

Систематизация опубликованной научной графики, представляющей характеристики континуального поглощения углекислого газа: публикации 1991–2000 гг.

Н.А. Лаврентьев, О.Б. Родимова, А.З. Фазлиев✉*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 02.05.2024;
после доработки 25.06.2024;
принята к печати 11.09.2024

Описана часть графиков коллекции «Континуальное поглощение молекулы диоксида углерода» информационной системы GrafOnto, извлеченных из публикаций 1991–2000 гг. Представлены термодинамические условия, при которых проведены измерения и расчеты, указаны физические величины и их размерности, а также исследованные спектральные и температурные интервалы. Кратко описан прогресс в решении задач континуального поглощения за указанный промежуток времени. Представлено расширение функциональности системы GrafOnto, связанное с детализацией структуры коллекции информационных ресурсов, содержащей множества (кластеры) примитивных графиков, относящихся к окнам прозрачности. В кластере, в свою очередь, выделяются семейства ближайших графиков с определенными свойствами. Выделение семейств позволяет использовать в анализе не только отдельные графики, но и их наборы, состав которых определяется спектральными или температурными величинами. В свойствах (метаданных) примитивных графиков добавилось семейство ближайших графиков. Созданная система научной графики GrafOnto предназначена для специалистов, занимающихся проблемами поглощения атмосферных газов.

Ключевые слова: информационная система GrafOnto, графические ресурсы по континуальному поглощению диоксида углерода, количественная оценка близости графиков, семейства ближайших примитивных графиков; GrafOnto information system, graphical resources of carbon dioxide continuum absorption plots, quantification of the proximity of similar plots, family of similar plots.

Введение

Систематизации ресурсов, относящихся к спектроскопии, уделяется значительное внимание [1, 2]. Эти ресурсы содержат в основном характеристики отдельных линий большого числа молекул. Заметим, что в [2] декларировалась систематизация научной графики как будущее развитие графических ресурсов. Систематизация сечений поглощения молекул и молекулярных комплексов представлена в [3]. Использование опубликованной графической информации является необходимой частью работы исследователя. Эта сторона деятельности была бы значительно облегчена, если бы соответствующие ресурсы были доступны в интернете и позволяли компьютерную обработку. В атмосферной спектроскопии систематизации таких ресурсов посвящены

работы о графических ресурсах информационной системы (ИС) GrafOnto, например характеризующих континуальное ИК-поглощение водяного пара [4]. В настоящей статье продолжена систематизация данных по континуальному поглощению углекислым газом, включающих графическую информацию в работах, опубликованных с 1991 по 2000 г.

В работах [5–52] этого периода по континуальному поглощению CO₂ продолжают экспериментальные исследования поглощения в спектральных интервалах, достаточно удаленных от центров сильных линий, при различных температурах и давлениях [9–12, 22–25, 30, 32, 35, 38]. Раз за разом эти исследования демонстрируют невозможность описания поглощения с применением лоренцевского контура. В теоретических исследованиях 1991–2000 гг. ведутся поиски подхода, который принимал бы во внимание особенности поглощения при больших смещенных частотах. Большое количество работ предлагало в качестве объяснения эффект интерференции (смешивания) линий [10, 44]. По определению это квантовый эффект, возникающий при наличии

* Николай Александрович Лаврентьев (lnick@iao.ru);
Ольга Борисовна Родимова (god@iao.ru); Александр За-
рипович Фазлиев (faz@iao.ru).

близко расположенных линий, т.е. при малых смещенных частотах. В публикациях 1991–2000 гг. приводились аргументы, позволяющие объявить эффект интерференции решающим при больших смещенных частотах. Работы другого направления связывали наблюдаемые закономерности с поведением контура линии при больших смещенных частотах, отличным от лоренцевского [16, 20, 46, 51]. В ряде исследований это отличие находилось эмпирически, исходя из согласия с экспериментом. Одновременно развивались варианты теории крыльев линий, в которых отличие контура от лоренцевского в крыле линии являлось следствием расчетов и оцениваемых приближений. Графики в цитируемых здесь работах позволяют количественно рассматривать применимость используемых подходов.

В большей части публикаций исследования континуального поглощения молекул фокусировались на нескольких спектральных интервалах (окнах прозрачности), границы которых были разными для разных молекул.

В ИС GrafOnto создана коллекция графиков «Континуальное поглощение молекул», в которой можно выделить две части, содержащие все графики коэффициентов поглощения молекул диоксида углерода (1-я часть) и воды (2-я часть), а также сводящихся к ним функций. Заметим, что эти графики составляют около 70% всех оригинальных примитивных графиков (примитивный график — это одна кривая или набор точек в одном координатном

пространстве) в информационной системе. Результаты исследований, отнесенные к окнам прозрачности, образуют кластеры графиков, характеризующие особенности поведения континуального поглощения в окнах прозрачности. Кластер графиков в окнах прозрачности можно разбивать на части в зависимости от термодинамических условий. Такое разбиение позволяет работать сразу со всем кластером графиков или его частями.

В настоящей статье на примере части коллекции графиков коэффициентов поглощения рассматривается процедура автоматического формирования кластеров графиков в ИС GrafOnto с использованием понятия «ближайший график». Она включает в себя количественную оценку близости графиков с помощью алгоритма метода оценки различия графиков, применяемого ранее для оценки качества цитирования графиков в коллекциях GrafOnto [4].

1. Описание коллекции графиков по континуальному поглощению молекулы CO₂

Основная информация о графиках в [9–43] приведена в табл. 1–4. Конечно, работ, посвященных континуальному поглощению углекислого газа, гораздо больше. Мы выбрали те из них, которые, по нашему мнению, отражают основные закономерности поглощения и качество которых допускает однозначную оцифровку.

Таблица 1

Спектральные функции CO₂ в области Q-полос ИК-диапазона

Год	Автор	Область спектра, см ⁻¹	Буферный газ	Парциальное давление CO ₂	Полное давление	Температура, К	Единицы оси <i>x</i>	Единицы оси <i>y</i>	Источник
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0–150 см ⁻¹ , индуцированный (CIA) спектр, 200 мкм									
Коэффициент поглощения									
Расчет									
1997	Gruszka, Borisov	0–250	CO ₂			233; 300; 400	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[36]
580–850 см ⁻¹ , Q-полосы, 15 мкм									
Функция пропускания									
Эксперимент; расчет									
1997	Kochel et al.	720,8–722,40 720,5–723,25	Воздух Воздух				см ⁻¹ см ⁻¹	0–1	[37]
Расчет									
1996	Tonkov et al.	740,5–742,5	N ₂				см ⁻¹	0–1	[33]
1998	Поляков и др.	721–721,2	Воздух				см ⁻¹	0–1	[40]
Коэффициент поглощения									
Эксперимент; расчет									
1996	Tonkov et al.	717–722	Ar	20 торр	Ar 730 торр		см ⁻¹	см ⁻¹	[29]
		717–722	He	17 торр	He 757 торр				
		615–620	He	17 торр	He 757 торр				
		664–672	He	4 торр	He 20 бар				
		663–667	He	80 торр	He 1,9 атм				
		595–599	He	80 торр	He 1,9 атм	см ⁻¹ см ⁻¹	Безразм. см ⁻¹		
1996	Khalil et al.	666–670	He	3 торр	He 0,5 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	[32]
		640–690	He	7,5 торр	He 9,4 атм				
				3 торр	He 0,5 атм				
				7,5 торр	He 9,4 атм				

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1280–1286 см ⁻¹ , Q-полоса, 7,78 мкм									
<i>Коэффициент поглощения</i>									
1995	Hartmann et al.	1285–1286				296	см ⁻¹	см ⁻¹	[26]
2020–2120 см ⁻¹ , Q-ветвь полосы 5 мкм									
<i>Функция пропускания</i>									
<i>Эксперимент; расчет</i>									
1991	Hartmann, Boulet	2020–2120	CO ₂		24,3; 51,4 амага	293	см ⁻¹	0–1	[10]
<i>Коэффициент поглощения</i>									
<i>Эксперимент</i>									
1991	Brodbeck et al.	3910–4570	CO ₂		30–60 бар	297,5	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[9]
5300–5320 см ⁻¹ , Q-полоса, 1,88 мкм									
<i>Коэффициент поглощения</i>									
<i>Расчет</i>									
1996	Tonkov et al.	5304–5320	N ₂		4,14 атм	296	см ⁻¹	произв. единиц	[33]

Примечание. В графах «парциальное и полное давление» в ряде случаев вместо давления приведено значение плотности в амага. Пересчет на давление прост, но мы предпочли оставить величины, приведенные в статьях.

Таблица 2

Спектральные функции CO₂ в области крыльев полос ИК-диапазона

Год	Автор	Область спектра, см ⁻¹	Буферный газ	Парциальное давление CO ₂	Полное давление	Температура, К	Единицы оси <i>x</i>	Единицы оси <i>y</i>	Источник
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
750–1150 см ⁻¹ , крыло полосы 15 мкм									
<i>Функция пропускания</i>									
<i>Эксперимент; расчет</i>									
1992	Parker et al.	750–1150	CO ₂		760 торр	800	см ⁻¹	0–1	[14]
2400–2500 см ⁻¹ , крыло полосы 4,3 мкм									
<i>Функция пропускания</i>									
<i>Эксперимент</i>									
1991	Roney et al.	2390–2600	Воздух		998,990 мбар	251,6; 303,3	см ⁻¹	0–1	[12]
<i>Расчет</i>									
1991	Несмелова и др.	2400–2550	N ₂		1–10 атм	296; 370	см ⁻¹	0–1	[13]
1992	Несмелова и др.	2400–2600	CO ₂		1,62; 17; 77 амага	291	см ⁻¹	0–1	[15]
<i>Коэффициент поглощения</i>									
<i>Эксперимент; расчет</i>									
1991	Hartmann, Boulet	2410–2510	CO ₂		10–60 бар	300–950	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[10]
1991	Menoux et al.	2157–2207	CO ₂			238; 218; 193	см ⁻¹	см ⁻¹	[11]
1991	Menoux et al.	2163–2246	N ₂			238; 218; 193	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[11]
1991	Roney et al.	2390–2600	Воздух		998,990 мбар	251,6; 303,3	см ⁻¹	км ⁻¹	[12]
1997	Ozanne et al.	2475–2570 2350–2580 6900–7000 2300–2400	Ar Ar Ar				см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻² см ⁻¹ · амага ⁻² см ⁻¹	[38]
1998	Rodrigous et al.	2420–2520	Ar He				см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[41]
1992	Несмелова и др.	2400–2600	CO ₂ N ₂			193; 291; 414; 534; 627; 751 193; 291; 448; 550; 623; 673; 773	см ⁻¹	κ _{calc} /κ _{exp}	[16]
1992	Несмелова и др.	2360–2390	CO ₂ N ₂			193; 296 193; 296	см ⁻¹	κ _{calc} /κ _{exp}	[16]
1992	Несмелова и др.	2410–2450	CO ₂			291; 673	см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[16]
1994	Ma, Tipping	2400–2580	CO ₂			296	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹ · атм ⁻¹	[2]
1994	Ma, Tipping	2400–2580	Ar			296	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹ · атм ⁻¹	[21]

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1995	Tvorogov	2410–2489	CO ₂			920	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[27]
1996	Ma et al.	2400–2700	Ar			296	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[34]
1998	Ma, Tipping	2375–2600	CO ₂			296	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[39]
			N ₂			218 296			
1999	Ma et al.	2400–2580	CO ₂			296; 218; 291; 414; 534; 627; 751	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[42]
3800–4600 см ⁻¹ , крыло полосы 2,3 мкм									
Коэффициент поглощения									
Эксперимент									
1991	Brodbeck et al.	3910–4570	CO ₂		30–60 бар	297,5	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[9]
Эксперимент; расчет									
1996	Tonkov et al.	3900–4100	CO ₂		20 амага		см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹	см ⁻¹ см ⁻¹ · амага ⁻² см ⁻¹	[30]
		3750–3950							
		3900–4700							
		3800–4700							
		3800–4700							
		3900–4100							
Расчет									
1993	Pollack et al.	4000–4600 4050–4600	CO ₂ H ₂ O			300; 500; 575	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹	[18]
4700–5200 см ⁻¹ , полоса 2 мкм									
Функция пропускания									
Эксперимент; расчет									
1991	Hartmann, Boulet	4700–5200	CO ₂		7,7; 91,4 амага 60,3 амага 55 атм	293 293 294; 493; 643	см ⁻¹	0–1	[10]
5600–6000 см ⁻¹ , крыло полосы 1,7 мкм									
Коэффициент поглощения									
Расчет									
1993	Pollack et al.	5600–6000	CO ₂			300; 675	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹	[18]
1993	Pollack et al.	5600–6000	H ₂ O			575	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹	[18]
6900–6980 см ⁻¹ , крыло полосы 1,4 мкм									
Коэффициент поглощения									
Эксперимент; расчет									
1994	Boissoles et al.	6985–6990	He	70 торр	He 3,95 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	[22]
		6990–7020					см ⁻¹	Безразм.	
		6900–7000	Ar	5,05 атм	He 143,1 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
		6980–6990	N ₂	98 торр	Ar 3,85 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
1994	Boissoles et al.	6900–7000		5,05 атм	N ₂ 143,1 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	[23]
		6985–6990	He	70 торр	He 3,95 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
1994	Boissoles et al.	6990–7010	He	5 атм	He 143 атм		см ⁻¹	Безразм.	[24]
		6990–7020							
		6990–7020							
		6965–6980		200 торр	He 7,9 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
1994	Thibault et al.	6990–7010		200 торр	He 9,4 атм		см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻²	[25]
		6965–6980		2,5 атм	He 63,6 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
		6900–7000		5,05 атм	He 143,1				
1996	Khalil et al.	6985–6989	He	46 торр	He 2,5 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	[32]
		6968–6994		159 торр	He 5 атм		см ⁻¹	см ⁻¹	
				46 торр	He 2,5 атм				
				159 торр	He 5 атм				
1997	Filippov et al.	6990–7060	CO ₂				см ⁻¹ см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻² см ⁻¹ · амага ⁻²	[35]

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1997	Ozanne et al.	6920–7000 6990–7020	Ar	3,26 амага 3,26 амага	Ar 283,1 амага Ar 545,5 амага		см ⁻¹ см ⁻¹	см ⁻¹ см ⁻¹ · амага ⁻²	[38]
<i>Расчет</i>									
1993	Filippov, Tonkov	6987,75–6989	He			296	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻¹	[17]
1993	Filippov, Tonkov	6987,75–6989	He			296	см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻¹	[17]
1993	Pollack et al.	6900–7000	H ₂ O			575	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹	[18]
1996	Filippov et al.	6990–7015 6900–7000 6900–7000 6900–7000 6900–7000	Ar	4,78 амага 4,68 амага 4,78 амага 4,68 амага 4,68 амага	100 амага Ar 112,3 амага Ar 169,4 амага Ar 112,3 амага Ar 169,4 амага Ar 169,4 амага	296	см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹	см ⁻¹ · амага ⁻² см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹ см ⁻¹	[31]
7500–9500 см ⁻¹ , крыло полосы 1,2 мкм									
<i>Коэффициент поглощения</i>									
<i>Расчет</i>									
1993	Pollack et al.	7500–9500	CO ₂ H ₂ O			300; 640; 575	см ⁻¹	см ² · молек. ⁻¹	[18]

Таблица 3

Температурные зависимости коэффициента поглощения CO₂

Год	Автор	Волновое число, см ⁻¹	Буферный газ	Температура, К	Единицы оси x	Единицы оси y	Источ- ник
1992	Несмелова и др.	$\omega = 2387,5; 2400; 2480;$ 2520; 2580	CO ₂	200–700	T, К	см ⁻¹ · амага ⁻¹	[15]
1993	Tsuboi et al.	$\omega = 2440–2460$	CO ₂	200–1200	T, К	см ⁻¹ · амага ⁻²	[19]

Таблица 4

Отличие контура линии от лоренцевского контура

Год	Автор	Отклонение от лоренцевского контура	Буферный газ	Температура, К	Единицы оси x	Единицы оси y	Источник
1991	Menoux et al.	$\chi(\Delta\omega)$	CO ₂ , N ₂	218; 193	$\Delta\omega$, см ⁻¹	χ (безразм.)	[11]
1994	Ma, Tipping	$\chi(\Delta\omega)$	CO ₂	296	$\Delta\omega$, см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[20]
1994	Ma, Tipping	$\chi(\Delta\omega)$	Ar	296	$\Delta\omega$, см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[21]
1996	Meadows, Crisp	$\chi(\Delta\omega)$, 1,18 мкм	CO ₂		$\Delta\omega$, см ⁻¹		[28]
1996	Ma et al.	$\chi(\Delta\omega)$, 4,3 мкм	Ar	296	$\Delta\omega$, см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[34]
1998	Ma, Tipping	$\chi(\Delta\omega)$, 4,3 мкм	Ar	296	$\Delta\omega$, см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[39]
1999	Ma et al.	$\chi(\Delta\omega)$, 4,3 мкм	CO ₂	218; 291; 414; 534; 627; 751	$\Delta\omega$, см ⁻¹	см ⁻¹ · атм ⁻¹	[42]

Экспериментальные исследования поглощения в крыльях полос продолжались в основном в СССР (Ленинградский государственный университет) и во Франции. Интересными были исследования излучения в атмосфере Венеры, для которых оказалось существенным поведение поглощения CO₂ в окнах прозрачности. Основные закономерности поведения коэффициента поглощения CO₂ в окнах прозрачности, отмеченные в предыдущие годы, нашли свое подтверждение и в работах исследуемого периода.

Неудачи с применением контура Лоренца для их объяснения привели к тому, что чаще всего измерения сопровождались расчетом (это видно из приведенных таблиц) с различными вариантами учета отклонений от лоренцевского контура. Что касается теоретического обоснования подобных действий, наиболее распространенным в цитируемых работах стал известный квантовый эффект интерференции линий.

Квантовый эффект интерференции спектральных линий может играть решающую роль в описании областей в пределах полос, где линии расположены близко друг к другу. Эти расчеты довольно многочисленны (см. табл. 1). Так, много работ было посвящено исследованию Q-ветвей колебательно-вращательных полос CO₂, а также области полосы 3v₃ около канта, где спектральные линии расположены достаточно близко по частоте, что способствует возникновению интерференции.

Однако появились и статьи, в которых поглощение в крыльях линий, т.е. при больших смещенных частотах, также объявлялось следствием интерференции линий. Одни из первых в этом направлении — работы [43–45]. Так, в [43] с использованием техники супероператоров были получены кинетические уравнения, основанные на марковском приближении (т.е. конечной длительностью столкновения пренебрегается), и при этом молекулы движутся по классическим траекториям, определяемым

изотропной частью потенциала межмолекулярного взаимодействия. Полученные выражения для элементов матрицы релаксации позволяют записать поправочную функцию для полосы за счет учета интерференции через комбинации интенсивностей линий. Эта функция не зависит от природы уширяющего газа, хотя результат ее применения и попадает в область экспериментальных значений. При этом она зависит обратным образом от числа учитываемых интерферирующих линий.

В работах [44–46] берутся за основу выражения для коэффициента поглощения через матричные элементы оператора релаксации, полученные при обращении резольвенты в первом порядке аналитической теории возмущений. Отдельные члены в сумме, представляющей коэффициент поглощения, могут становиться отрицательными при росте смещенной частоты, что и приводит к выводу о решающей роли интерференции в крыльях полос. Далее вводятся приближения: IOSA (infinite order sudden approximation) – ударное приближение с бесконечным временем, ESCA (energy corrected sudden approximation) – ударное приближение с исправленной энергией, которые активно используются в последующих статьях с разной степенью успеха.

Оба эти направления основываются на работе Фано [47], в которой получено выражение для оператора релаксации. Это выражение $-\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$ – содержит в качестве слагаемого интегральный член Φ_2 , который не рассматривается в упомянутых работах. Однако известно [48, 49], что Φ_1 определяет асимптотику центра линии ($|\omega - \omega_0| < \gamma$), в то время как Φ_2 определяет асимптотику крыла линии ($|\omega - \omega_0| \gg \gamma$), ω_0 – частота центра линии, γ – ее полуширина. Величины Φ_1 и Φ_2 различаются и физически, и математически, и переход в Φ_1 к большому смещенным частотам не означает описания крыла линии. Как оказалось, интегральный член в формуле Фано, призванный описывать коэффициент поглощения при больших смещенных частотах, ни в одной из упомянутых публикаций по интерференции не оценивался. Иными словами, опубликованные расчеты не выходят за рамки асимптотики малых смещенных частот. Подробный анализ приближений, используемых в работах, отстаивающих решающую роль интерференции в крыльях полос, выполнен в [50] и свидетельствует о ее незначительном вкладе в поглощение при больших смещенных частотах (см. также [51]).

В асимптотической теории крыльев линий [48, 52] использован метод кинетических уравнений. Получено кинетическое уравнение, два слагаемых в котором относятся при асимптотических оценках либо к малым, либо к большим смещенным частотам. При этом установлено соответствие этих слагаемых членам в формуле Фано. Асимптотическая теория крыльев линий оценивает роль интерференции в далеком крыле как несущественную и в то же время позволяет описать как спектральное, так и температурное поведение коэффициента поглощения в крыльях полос CO_2 (см., например, [52, 53]).

2. Кластеризация графиков

В коллекциях ИС GrafOnto число примитивных графиков намного больше числа представленных на графиках функций. Это неравенство позволяет кластеризовать графики коллекций. В табл. 5 представлены окна прозрачности, количество графиков всей коллекции «Континуальное поглощение молекул» и количество графиков коэффициентов поглощения (КП). Количество графиков в окне прозрачности позволяет судить о детальности его исследований, представленных в ИС GrafOnto. В информационную систему включены приложения, отображающие подобные кластеры или распределение графиков по ограничениям на их свойства. Для сравнения в табл. 5 приведены кластеры графиков для воды и диоксида углерода в окнах прозрачности.

Таблица 5

Количество оригинальных примитивных графиков, характеризующих континуальное поглощение CO_2 в девяти и H_2O в двенадцати спектральных интервалах

Длина волны, мкм	Волновые числа, см^{-1}	Все графики	Графики КП
<i>Молекула CO_2</i>			
10000–20,0	0–500	87	43
20,0–5,0	500–2000	176	63
5,0–4,17	2000–2400	331	210
4,17–3,85	2400–2600	412	253
3,85–2,63	2600–3800	128	64
2,63–1,92	3800–5200	133	76
1,92–1,56	5200–6400	78	37
1,56–1,33	6400–7500	131	96
1,33–1,0	7500–10000	41	37
Всего		1517	869
<i>Молекула H_2O</i>			
10000–20,0	0–500	446	352
20,0–8,0	500–1250	527	412
8,0–5,0	1250–2000	353	278
5,0–3,33	2000–3000	449	383
3,33–2,38	3000–4200	347	265
2,38–2,0	4200–5000	241	187
2,0–1,72	5000–5800	175	145
1,72–1,52	5800–6600	171	157
1,52–1,33	6600–7500	144	130
1,33–1,2	7500–8300	103	90
1,2–1,08	8300–9200	82	70
1,08–1,0	9200–10000	82	62
Всего		3119	2631

Заметим, что если части графика попадают в несколько интервалов колонок «Все графики» и «Графики КП», то эти части учитываются как график в каждом из них.

На диаграммах интенсивности (рис. 1) молекул воды и диоксида углерода серые вертикальные линии определяют границы интервалов волновых чисел, приведенных в табл. 5.

Для молекулы H_2O наибольшее число графиков, содержащих КП, приходится на интервал 5–20 мкм, а для молекулы CO_2 на 4,17–3,85 мкм.

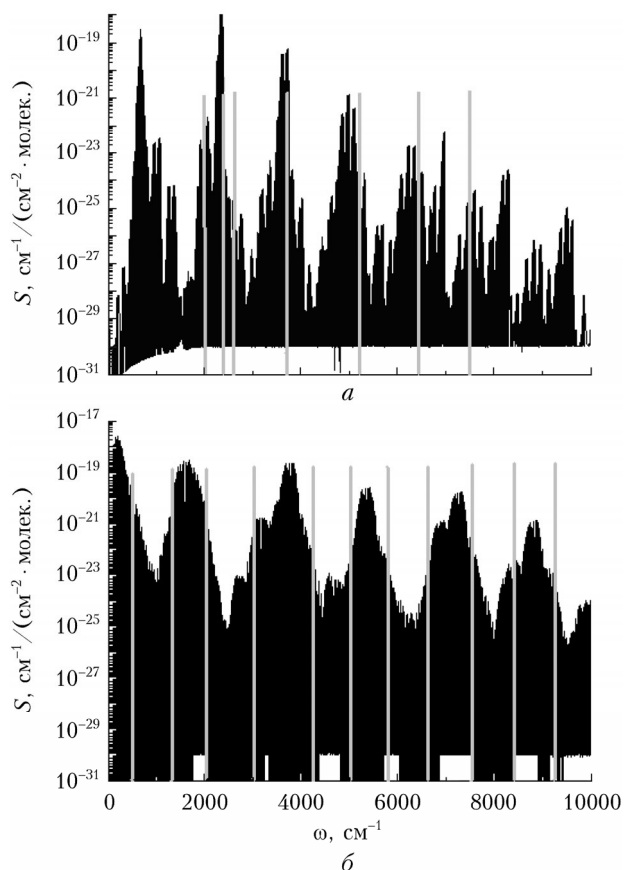


Рис. 1. Интенсивность и частотные интервалы молекул диоксида углерода (а) и воды (б). Численные значения границ частотных интервалов представлены в табл. 5

Эти интервалы наиболее детально исследованы. Актуальное количество графиков по континуальному поглощению в приведенных в таблице спектральных интервалах для CO_2 и H_2O можно найти по адресу <https://plots.saga.iao.ru/stat/wn/>.

3. Ближайшие графики и распределение их пар по интервалам частот

В работе [4] подробно описана процедура автоматического поиска цитируемого графика и оценки качества цитирования статей для коллекции графиков, использующая количественную оценку различия при сравнении двух графиков. Она применяется для оценки близости произвольного графика ко всем графикам коллекции.

При расчете оценки близости графиков используются некоторые ограничения: оцениваются только общие части оригинальных примитивных графиков, описывающие КП одинаковых веществ с небольшим различием в термодинамических условиях (не более ± 10 К для температуры и $\pm 10\%$ для давления), и другие спектральные функции, для единиц измерения которых в ИС есть коэффициенты для перевода в единицы измерений коэффициентов поглощения.

Созданный интерфейс для загрузки примитивного графика позволяет отображать автоматически

вычисленную величину близости загружаемого графика с каждым ближайшим к нему графиком и представляет ее как часть свойств (метаданных) примитивного графика. На рис. 2 и 3 показаны три части этого интерфейса отображения примитивных и составных графиков.

Для демонстрации новой части метаданных выбран график из статьи [54], характеризующий поглощение молекулой диоксида углерода и содержащий зависимость измеренного коэффициента поглощения от волновых чисел. Этот примитивный график показан на рис. 2, а. На рис. 2, б представлены его свойства и свойства ближайшего графика с минимальной оценкой близости, равной 7,9%. Отметим, что этот ближайший график с минимальной оценкой представляет результаты теоретического расчета, опубликованного в той же статье [54].

На рис. 3 показан составной график, являющийся третьей частью интерфейса, содержащий исходный график и все семейство 18 ближайших графиков с оценкой близости меньше 20%. Отметим, что эти графики находятся в интервале 4,17–3,85 мкм, содержащем максимальное число пар ближайших графиков. Как следует из рис. 3, некоторые графики коллекции образуют в кластере семейство ближайших графиков, показывающее области проведения близких по величине расчетов и измерений. Очевидно, что при разных температурах в этом спектральном интервале будут создаваться новые семейства графиков, характеризующие изменения КП. Показанный на рис. 3 набор ближайших графиков связан с графиком на рис. 2, а ограничением на свойство *Оценка близости графиков* ($R < 20\%$). Ниже такого рода набор графиков будем называть семейством ближайших графиков.

При анализе коллекции графиков «Континуальное поглощение молекул CO_2 и H_2O » ограничимся задачей выделения пар коррелирующих графиков в окнах прозрачности молекул.

Кластеризация графиков по окнам прозрачности показана в табл. 5. Сначала выясняется распределение пар коррелирующих графиков в спектральном интервале 0–10000 cm^{-1} . Результат анализа этого распределения представлен в табл. 6.

Таблица 6
Распределение пар коррелирующих графиков в зависимости от интервала значений оценки близости R , %

[0; 10)	[10; 25)	[25; 50)	[50; 100)	Всего
Все молекулы				
2454	3736	6997	39921	53105
[0; 10)		[10; 20)	[20; 50)	
Молекула CO ₂				
808		981	2680	
Молекула H ₂ O				
1621		1379	5532	

Для всех веществ этой коллекции число сравниваемых пар графиков равно 53105, для молекулы CO_2 оно равно 13452, для H_2O — 30518. Если принять ограничение $R < 10\%$ как критерий выбора в группу ближайших графиков, то в нее попадут

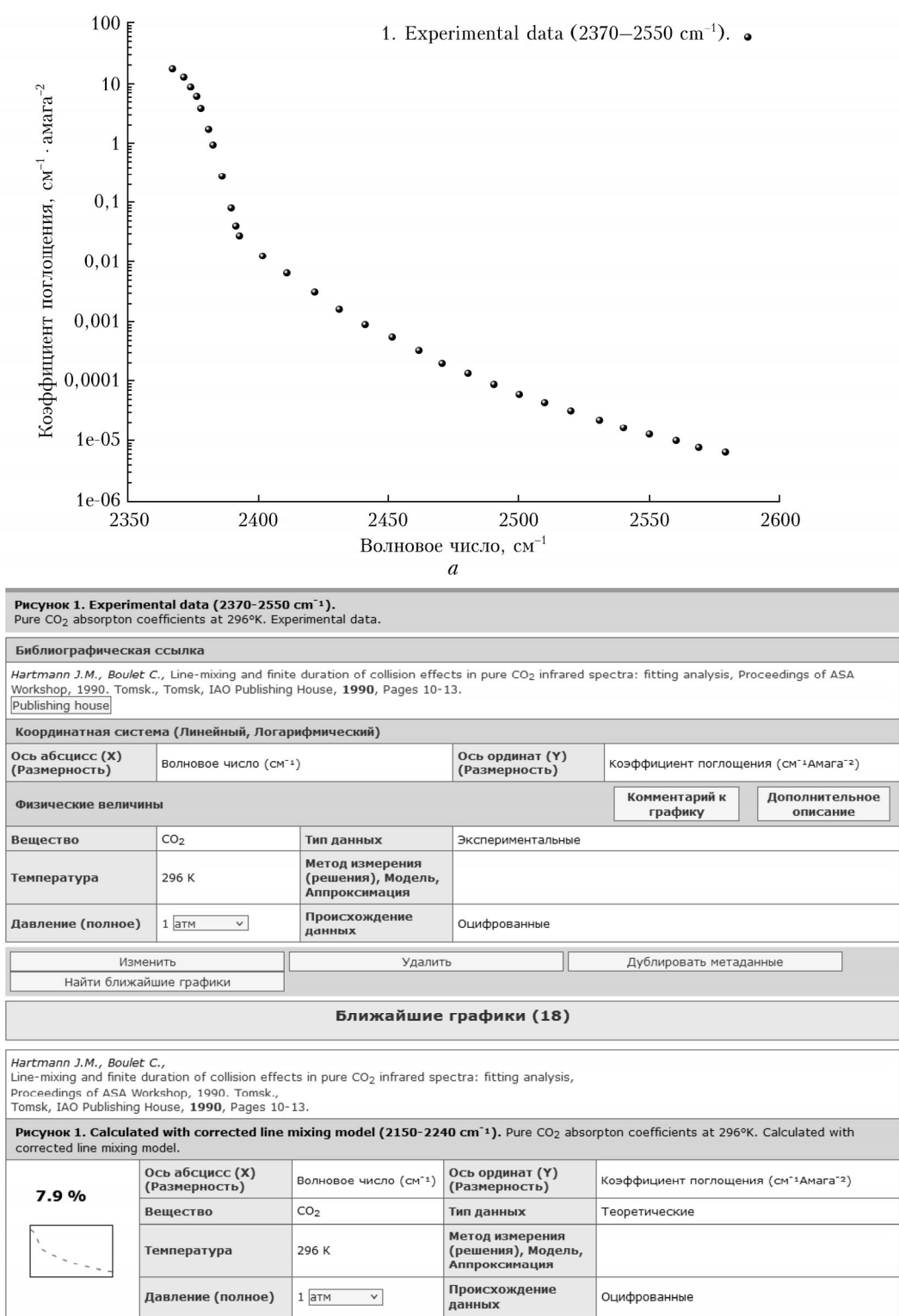


Рис. 2. Верхний (а) и средний фрагменты (б) интерфейса, представляющие график, его свойства и новые метаданные, описывающие ближайшие графики

2454 пар для всех веществ, из них 808 пар для диоксида углерода и 1621 пара для воды. Из табл. 6 следует, что в основном в число коррелирующих графиков попали графики, относящиеся к молекулам

воды и диоксида углерода, с функциями, сводящимися к КП. По этой причине далее рассматривается только часть коллекции, относящаяся к графикам, связанным с водой и диоксидом углерода.

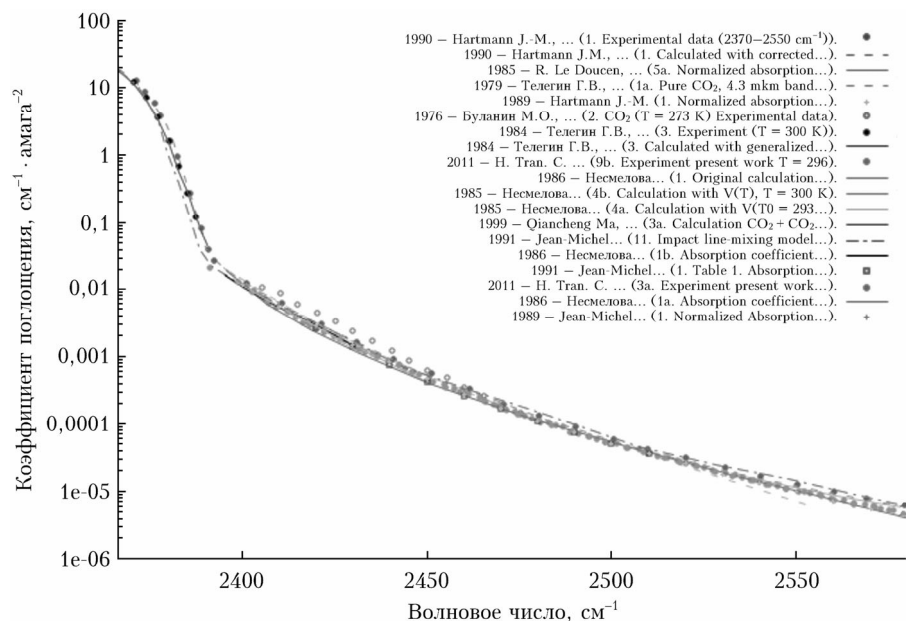


Рис. 3. Составной график, характеризующий непрерывное поглощение CO_2 , содержащий все ближайшие графики коллекции к графику на рис. 2, а, отображенному и на этом рисунке

Заметим, что приведенные в табл. 6 данные могут изменяться со временем, что обусловлено расширением коллекций графиков. Актуальные значения распределения пар ближайших графиков в коллекциях ИС GrafOnto можно найти по адресу <https://plots.saga.iao.ru/stat/similar/>.

В табл. 7 показано количество пар ближайших графиков и количество уникальных графиков, входящих в эти пары, в каждом из окон прозрачности. Третья и пятая колонки табл. 7 показывают количество уникальных графиков в окнах прозрачности и количество уникальных графиков, входящих в пары ближайших графиков, соответственно. Разность этих чисел указывает на количество некор-

релирующих графиков в окне прозрачности при $R < 10\%$. Определенный интерес представляет та часть коллекции графиков, которая не коррелирует ни с одним графиком коллекции.

Указанное в четвертой колонке количество пар ближайших графиков ограничивает размеры и типы семейств ближайших графиков в коллекции графиков по непрерывному поглощению для каждого из окон прозрачности.

На рис. 4 показан составной график, представляющий семейство ближайших графиков, порожденное графиком из публикации [55]. Порождающий график является первым в перечне графиков на рис. 4.

Таблица 7

Число пар коррелирующих графиков с $R < 10\%$ в зависимости от спектрального интервала					
Длина волны, мкм	Волновые числа, см^{-1}	Число графиков КП	Число коррелирующих графиков КП	Пары графиков КП	Число уникальных графиков, входящих в пары
<i>Молекула CO_2 (330)</i>					
1000–20,0	0–500	43	26	11	9
20,0–5,0	500–2000	63	46	9	7
5,0–4,17	2000–2400	210	150	193	71
4,17–3,85	2400–2600	253	164	364	85
3,85–2,63	2600–3800	64	50	24	16
2,63–1,92	3800–5200	76	62	52	26
1,82–1,56	5200–6400	37	35	12	9
1,56–1,33	6400–7500	96	74	66	24
1,33–1,0	7500–10000	37	34	5	4
<i>Молекула H_2O (836)</i>					
10000–20,0	0–500	352	219	259	94
20,0–8,0	500–1250	412	230	766	125
8,0–5,0	1250–2000	278	153	275	95
5,0–3,33	2000–3000	383	169	363	104
3,33–2,38	3000–4200	265	113	93	45
2,38–2,0	4200–5000	187	64	122	41
2,0–1,72	5000–5800	145	47	103	31
1,72–1,52	5800–6600	157	52	120	34
1,52–1,33	6600–7500	130	43	122	33
1,33–1,2	7500–8300	90	32	109	24
1,2–1,08	8300–9200	70	28	93	19
1,08–1,0	9200–10000	62	27	88	14

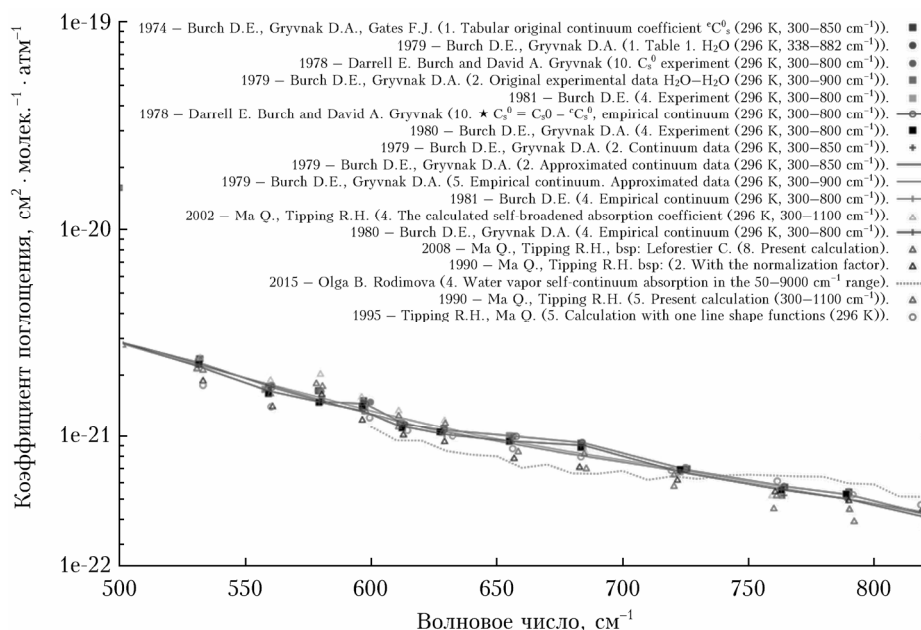


Рис. 4. Составной график, характеризующий континуальное поглощение H_2O , содержащий семейство ближайших графиков ($R < 20\%$), порожденное графиком (таблицей) из работы [55]

Как следует из примеров семейств ближайших графиков, они образуются при достаточно большом количестве коррелирующих пар графиков в окнах прозрачности. Если количество пар небольшое, то окна прозрачности слабо изучены.

Заключение

В настоящей статье приведен обзор графиков, характеризующих континуальное поглощение молекулы диоксида углерода, извлеченных из публикаций 1991–2000 гг. Она продолжает нашу работу [56], в которой рассмотрен начальный период исследований континуального поглощения диоксида углерода. В обзоре описаны результаты исследований по континуальному поглощению молекулы диоксида углерода, загруженные в настоящее время в базу данных ИС GrafOnto.

Графики, включенные в систему, относились либо к спектральным интервалам, которые не исследовались ранее, либо к существенным дополнениям к изученным ранее закономерностям. Невозможность описать полученные для континуального поглощения результаты как суммарный эффект линий с лоренцевским контуром не подвергается сомнению, и основное внимание в теоретических работах уделяется поиску моделей, которые могли бы приблизить к пониманию физических причин, вызывающих такое нестандартное поведение поглощения. Следует отметить два направления, в которых развивались исследования. Это использование контуров линий, имеющих специфическую форму при больших смещенных частотах, и изменение спектра полос вследствие взаимодействия (интерференция (или смешивание)) спектральных линий. В последних работах авторы склоняются к оценке роли ин-

терференции при больших смещенных частотах как к несущественной.

Приведены оценки различия цитирующих и цитируемых графиков коллекции «Континуальное поглощение молекулы диоксида» для молекулы диоксида углерода и смесей с этой молекулой, а также оценки близости пар графиков в окнах прозрачности.

Приведено количество графиков и коррелирующих пар по оценке близости для каждого окна прозрачности, показаны некоторые семейства близости графиков из кластеров, содержащих максимальное число графиков. В расчетную часть программного обеспечения включена программа расчета оценки близости графиков. Для каждого загружаемого графика построено семейство ближайших графиков, порождаемых им. Эти оценки указывают на существование в коллекциях семейств ближайших графиков. Выявление таких семейств позволит в автоматическом режиме проводить систематизацию коллекций графиков в окнах прозрачности по разным физическим параметрам.

Процедура автоматического выделения семейств ближайших графиков в кластерах окон прозрачности будет рассмотрена в дальнейших работах.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН (ЕГИСУ № 121031500297-3).

Список литературы

1. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacqu-

- mart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canéu E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kassi S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tybías R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vidasin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N.* The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 2022. V. 277. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
2. Albert D., Antony B.K., Awa Ba Y., Babikov Y.L., Bollard P., Boudon V., Delahaye F., Del Zanna G., Dimitrijević M.S., Drouin B.J., Dubernet M.-L., Duensing F., Emoto M., Endres C.P., Fazliev A.Z., Glorian J.-M., Gordon I.E., Gratier P., Hil C., Jevremović D., Joblin C., Kwon D.-H., Kochanov R.V., Krishnakumar E., Leto G., Loboda P.A., Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Marinković B.P., Markwick A., Marquart T., Mason N.J., Mendoza C., Millar T.J., Moreau N., Morozov S.V., Möller T., Müller H.S.P., Mulas G., Murakami I., Pakhomov Y., Palmeri P., Penguen J., Perevalov V.I., Piskunov N., Postler J., Privezentsev A.I., Quinet P., Ralchenko Y., Rhee Y.-J., Richard C., Rixon G., Rothman L.S., Roueff E., Ryabchikova T., Sahal-Bréchet S., Scheier P., Schilke P., Schlemmer S., Smith K.W., Schmitt B., Skobelev I.Yu., Srećković V.A., Stempels E., Tashkun S.A., Tennyson J., Tyuterev V.G., Vastel C., Vujčić V., Wakelam V., Walton N.A., Zeppen C., Zwiölf C.M. A decade with VAMDC: Results and ambitions // *Atoms.* 2020. V. 8, N 4. P. 76. DOI: 10.3390/atoms8040076.
3. Keller-Rudek H., Moortgat G.K., Sander R., Sørensen R. The MPI-Mainz UV/VIS spectral atlas of gaseous molecules of atmospheric interest // *Earth Syst. Sci. Data.* 2013. V. 5. P. 365–373. DOI: 10.5281/zenodo.6951.
4. Лаврентьев Н.А., Родимова О.Б., Фазлиев А.З. Систематизация опубликованной научной графики, представляющей характеристики непрерывного поглощения водяного пара. III. Публикации 2001–2020 гг. // *Оптика атмосфер. и океана* 2023. Т. 36, № 7. С. 541–556. DOI: 10.15372/AOO20230703; Lavrentiev N.A., Rodimova O.B., Fazliev A.Z. Systematization of published scientific graphics characterizing the water vapor continuum absorption: III – Publications of 2001–2020 // *Atmos. Ocean. Opt.* 2023. V. 36, N 6. P. 622–638. DOI: 10.1134/S102485602306012X.
5. Scutaru D., Rosenmann L., Taine J., Wattson R.B., Rothman L.S. Measurements and calculations of CO₂ absorption at high temperature in the 4.3 and 2.7 μ m regions // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1993. V. 50, N 2. P. 179–191.
6. Ozanne L., Nguyen-Van-Thanh, Brodbeck C., Bouanich J.P., Hartmann J.M., Boulet C. Line mixing and nonlinear density effects in the ν_3 and $3\nu_3$ infrared bands of CO₂ perturbed by He up to 1000 bar // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102, N 19. P. 7306–7316.
7. Hartmann J.M., L'Haridon F. Simple modeling of line-mixing effects in IR bands. I. Linear molecules: Application to CO₂ // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103, N 15. P. 6467–6478.
8. Boisssoles J., Thibault F., Boulet C. Line mixing effects in the 15 μ m Q-branches of CO₂ in helium: Theoretical analysis // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1996. V. 56, N 6. P. 835–853.
9. Brodbeck C., Vanthanh N., Bouanich J.P., Boulet C., Jeanlouis A., Bezard B., De Berch C. Measurements of pure CO₂ absorption at high-densities near 2.3- μ m // *J. Geophys. Res.* 1991. V. 96, N E2. P. 17497–17500. DOI: 10.1029/91je01680.
10. Hartmann J.M., Boulet C. Line mixing and finite duration of collision effects in pure CO₂ infrared-spectra – fitting and scaling analysis // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 94, N 10. P. 6406–6419. DOI: 10.1063/1.460270.
11. Menoux V., Le Doucen R., Boisssoles J., Boulet C. Line-shape in the low-frequency wing of self-broadened and N₂-broadened ν_3 CO₂ lines – temperature-dependence of the asymmetry // *Appl. Opt.* 1991. V. 30, N 3. P. 281–286. DOI: 10.1364/AO.30.000281.
12. Roney P.L., Reid F., Theriault J.M. Transmission window near 2400 cm⁻¹ – an experimental and modeling study // *Appl. Opt.* 1991. V. 30, N 15. P. 1995–2004. DOI: 10.1364/ao.30.001995.
13. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. О поведении коэффициента поглощения при изменении давления в крыле полосы 4,3 мкм CO₂ // *Оптика атмосфер.* 1991. Т. 4, № 7. С. 745–752.
14. Parker R.A., Esplin M.P., Wattson R.B., Hoke M.L., Rothman L.S., Blumberg W.A.M. High temperature absorption measurements and modeling of CO₂ for the 12 micron window region // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1992. V. 48, N 5–6. P. 591–597. DOI: 10.1016/0022-4073(92)90123-L.
15. Nesmelova L.I., Rodimova O.B., Tvorogov S.D. On the role of continual and selective absorption in the wing of the 4.3 μ m CO₂ band at high pressures and temperatures // *Proc. SPIE.* 1992. V. 1811. P. 291–294.
16. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Спектральное поведение коэффициента поглощения в полосе 4,3 мкм CO₂ в широком диапазоне температур и давлений // *Оптика атмосфер. и океана.* 1992. Т. 5, № 9. С. 939–946.
17. Filippov N.N., Tonkov M.V. Semiclassical analysis of line mixing in the infrared bands of CO and CO₂ // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1993. V. 50, N 1. P. 111–125.
18. Pollack J.B., Dalton J.B., Grinspoon D., Wattson R.B., Freedman R., Crisp D., Allen D.A., Bezard B., DeBergh C., Giver L.P., Ma Q., Tipping R. Near-infrared light from Venus' nightside: A spectroscopic analysis // *Icarus.* 1993. V. 103. P. 1–42.
19. Tsuboi T., Arimitsu N., Hartmann J.M. High temperature absorption by pure CO₂ far line wings in the 4 μ m region // *Japan J. Appl. Phys.* 1993. V. 32. N 12A. P. L1778–780.
20. Ma Q., Tipping R.H. An improved quasistatic line-shape theory: The effects of molecular motion on the line wings // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 100, N 8. P. 5567–5579.
21. Ma Q., Tipping R.H. Extension of the quasistatic far-wing line shape theory to multicomponent anisotropic potentials // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 100, N 12. P. 8720–8736.
22. Boisssoles J., Le Doucen R., Thibault F., Boulet C. The $3\nu_3$ band of CO₂-influence of the pressurized perturber gas // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1994. V. 52, N 3/4. P. 361–366.
23. Boisssoles J., Thibault F., Le Doucen R., Menoux V., Boulet C. Line mixing effects in the 00⁰3–00⁰0 band of

- CO₂ in helium. III. Energy corrected sudden simultaneous fit of line widths and near wing profile // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 101, N 8. P. 6552–6558.
24. Boisssoles J., Thibault F., Le Doucen R., Menoux V., Boulet C. Line mixing effects in the 00⁰3–00⁰0 band of CO₂ in helium. II. Theoretical analysis // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 100, N 1. P. 215–223.
 25. Thibault F., Boisssoles J., Le Doucen R., Menoux V., Boulet C. Line mixing effects in the 00⁰3–00⁰0 band of CO₂ in helium. I. Experiment // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 100, N 1. P. 210–214.
 26. Hartmann J.-M., Boulet C., Margottin-Maclou M., Rachet F., Khalil B., Thibault F., Boisssoles J. Simple modelling of Q-branch absorption – I. Theoretical model and application to CO₂ and N₂O // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1995. V. 54, N 4. P. 705–722.
 27. Творогов С.Д. Проблема периферии контура спектральных линий в атмосферной оптике // *Оптика атмосф. и океана.* 1995. Т. 8, № 1–2. С. 18–30.
 28. Meadows V.S., Crisp D. Ground-based near-infrared observations of the Venus nightside: The thermal structure and water abundance near the surface // *J. Geophys. Res.* 1996. V. 101, N E2. P. 4595–4622.
 29. Tonkov M.V., Boisssoles J., Le Doucen R., Khalil B., Thibault F. Q-branch shapes of CO₂ spectrum in 15 μ m region: Experiment // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1996. V. 55, N 3. P. 321–334.
 30. Tonkov M.V., Filippov N.N., Bertsev V.V., Bouanich J.P., Van-Thanh N., Brodbeck C., Hartmann J.M., Boulet C., Thibault F., Le Doucen R. Measurements and empirical modeling of pure CO₂ absorption in the 2.3- μ m region at room temperature: Far wings, allowed and collision-induced bands // *Appl. Opt.* 1996. V. 35, N 24. P. 4863–4870.
 31. Filippov N.N., Bouanich J.-P., Hartmann J.-M., Ozanne L., Boulet C., Tonkov M.V., Thibault F., Le Doucen R. Line-mixing effects in the 3v₃ band of CO₂ perturbed by Ar // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1996. V. 55, N 3. P. 307–320.
 32. Khalil B., Cisse O., Moreau G., Thibault F., Le Doucen R., Boisssoles J. Line mixing and line broadening in CO₂ bands perturbed by helium at 193 K // *Chem. Phys. Lett.* 1996. V. 263, N 6. P. 811–816.
 33. Tonkov M.V., Filippov N.N., Timofeyev Yu.M., Polyakov A.V. A simple model of the line mixing effect for atmospheric applications: Theoretical background and comparison with experimental profiles // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1996. V. 56, N 5. P. 783–795.
 34. Ma Q., Tipping R.H., Boulet C. The frequency detuning and bandaverage approximations in a farwing line shape theory satisfying detailed balance // *J. Chem. Phys.* 1996. V. 104, N 24. P. 9678–9688.
 35. Filippov N.N., Bouanich J.P., Boulet C., Tonkov M.V., LeDoucen R., Thibault F. Collision-induced double transition effects in the 3v₃ CO₂ band wing region // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106, N 6. P. 2067–2072.
 36. Gruszka M., Borysow A. Roto-translational collision-induced absorption of CO₂ for the atmosphere of Venus at frequencies from 0 to 250 cm⁻¹, at temperatures from 200 to 800 K // *Icarus.* 1997. V. 129. P. 172–177.
 37. Kochel J.-M., Hartmann J.-M., Camy-Peyret C., Rodrigues R., Payan S. Influence of line mixing on absorption by CO₂ Q branches in atmospheric balloon-borne spectra near 13 μ m // *J. Geophys. Res.* 1997. V. 102, N D11. P. 12891–12899.
 38. Ozanne L., Ma Q., Nguyen-Van-Thanh, Brodbeck C., Bouanich J.P., Hartmann J.-M., Boulet C., Tipping R.H. Line-mixing, finite duration of collision, vibrational shift, and non-linear density effects in the v₃ and 3v₃ bands of CO₂ perturbed by Ar up to 1000 bar // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1997. V. 58, N 2. P. 261–277.
 39. Ma Q., Tipping R.H. The distribution of density matrices over potential-energy surfaces: Application to the calculation of the far-wing line shapes for CO₂ // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 108, N 9. P. 3386–3399. DOI: 10.1117/12.724923.
 40. Поляков А.В., Тимофеев Ю.М., Тонков М.В., Филиппов Н.Н. Влияние интерференции спектральных линий на функции пропускания атмосферы в полосах поглощения CO₂ // *Изв. АН. Физ. атмосф. и океана.* 1998. Т. 34, № 3. С. 357–367.
 41. Rodrigues R., Boulet C., Bonamy L., Hartmann J.-M. Temperature, pressure and perturber dependencies of line-mixing effects in CO₂ infrared spectra. II. Rotational angular momentum relaxation and spectral shift in $\Sigma \leftarrow \Sigma$ bands // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109, N 8. P. 3037–3047. DOI: 10.1063/1.476921.
 42. Ma Q., Tipping R.H., Boulet C., Bouanich J.P. Theoretical far-wing line shape and absorption for high temperature CO₂ // *Appl. Opt.* 1999. V. 38, N 3. P. 599–604. DOI: 10.1364/ao.38.000599.
 43. Bulanin M.O., Dokuchaev A.B., Tonkov M.V., Filippov N.N. Influence of the line interference on the vibratio-rotation band shapes // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 1984. V. 31, N 6. P. 521–543.
 44. Boisssoles J., Boulet C., Robert D., Green S. IOS and ECS line coupling calculation for the CO–He system: Influence on the vibration-rotation band shapes // *J. Chem. Phys.* 1987. V. 87, N 6. P. 3436–3446.
 45. Boulet C., Boisssoles J., Robert D. Collisionally induced population transfer effect in infrared absorption spectra. I. A line-by-line coupling theory from resonances to the far wings // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 89, N 2. P. 625–634.
 46. Strow L.L., Reuter D. Effect of line mixing on atmospheric brightness temperature near 15 μ m // *Appl. Opt.* 1988. V. 27, N 5. P. 872–878.
 47. Fano U. Pressure broadening as a prototype of relaxation // *Phys. Rev.* 1963. V. 131, N 1. P. 259–268.
 48. Творогов С.Д., Родимова О.Б. Spectral line shape. I. Kinetic equation for arbitrary frequency detunings // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102, N 22. P. 8736–8745.
 49. Творогов С.Д., Родимова О.Б. Столкновительный контур спектральных линий. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2013. 196 с.
 50. Творогов С.Д., Родимова О.Б., Несмелова Л.И. Спектральный обмен и периферия контура спектральных линий. Критический обзор // *Оптика атмосф.* 1990. Т. 3, № 5. С. 468–481.
 51. Творогов С.Д., Родимова О.Б., Несмелова Л.И. О роли интерференции в далеких крыльях спектральных линий CO₂ // *Оптика атмосф. и океана.* 2003. Т. 16, № 11. С. 964–968.
 52. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. Новосибирск: Наука, 1986. 216 с.
 53. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Спектральное поведение коэффициента поглощения в полосе 4,3 μ m CO₂ в широком диапазоне температур и давлений // *Оптика атмосф. и океана.* 1992. Т. 5, № 9. С. 939–946.
 54. Hartmann J.M., Boulet C. Line-mixing and finite duration of collision effects in pure CO₂ infrared spectra: Fitting analysis // *Proc. ASA Workshop, Tomsk, 1990.* P. 10–13.

55. *Burch D.E., Gryvnak D.A., Gates F.J.* Continuum absorption by H_2O between 330 and 825 cm^{-1} , Final Report for Period 16 October 1973 – 30 September 1974, AFCRL-TR-74-0377. Aeronutronic Division, Philco Ford Corporation, 1974.

56. *Lavrent'ev N.A., Rodimova O.B., Fazliev A.Z.* Systematization of published scientific graphics, representing continuum absorption of carbon dioxide: Publications of 1956–1990 // *Proc. SPIE*. 2021. V. 19916. P. 1191606. DOI: 10.1117/12.2603246.

N.A. Lavrent'ev, O.B. Rodimova, A.Z. Fazliev. **Systematization of published research plots representing spectral data related to the carbon dioxide continuum absorption. 2. Publication of 1991–2000.**

The article describes part of the collection of plots “Continuous absorption of a carbon dioxide molecule” of the GrafOnto information system (IS) extracted from publications of 1991–2000. The thermodynamic conditions under which measurements and calculations were carried out are given, physical quantities and their dimensions are indicated, as well as the spectral and temperature intervals under study. The progress in solving continuum absorption problems in the specified period of time is briefly described. The expansion of the functionality of the GrafOnto IS is described. The extension addressed the problem of plots in a collection, which can be separated into families of similar plots contained in clusters of plots formed in transparency windows. The selection of families allows you to use not only individual plots in the analysis, but also their sets, the composition of which is determined by spectral or temperature quantities. A family of similar plots has been added to the properties (metadata) of primitive plots. The quantitative assessment of the proximity of plots has been introduced.