

KfK 4364

Mai 1988

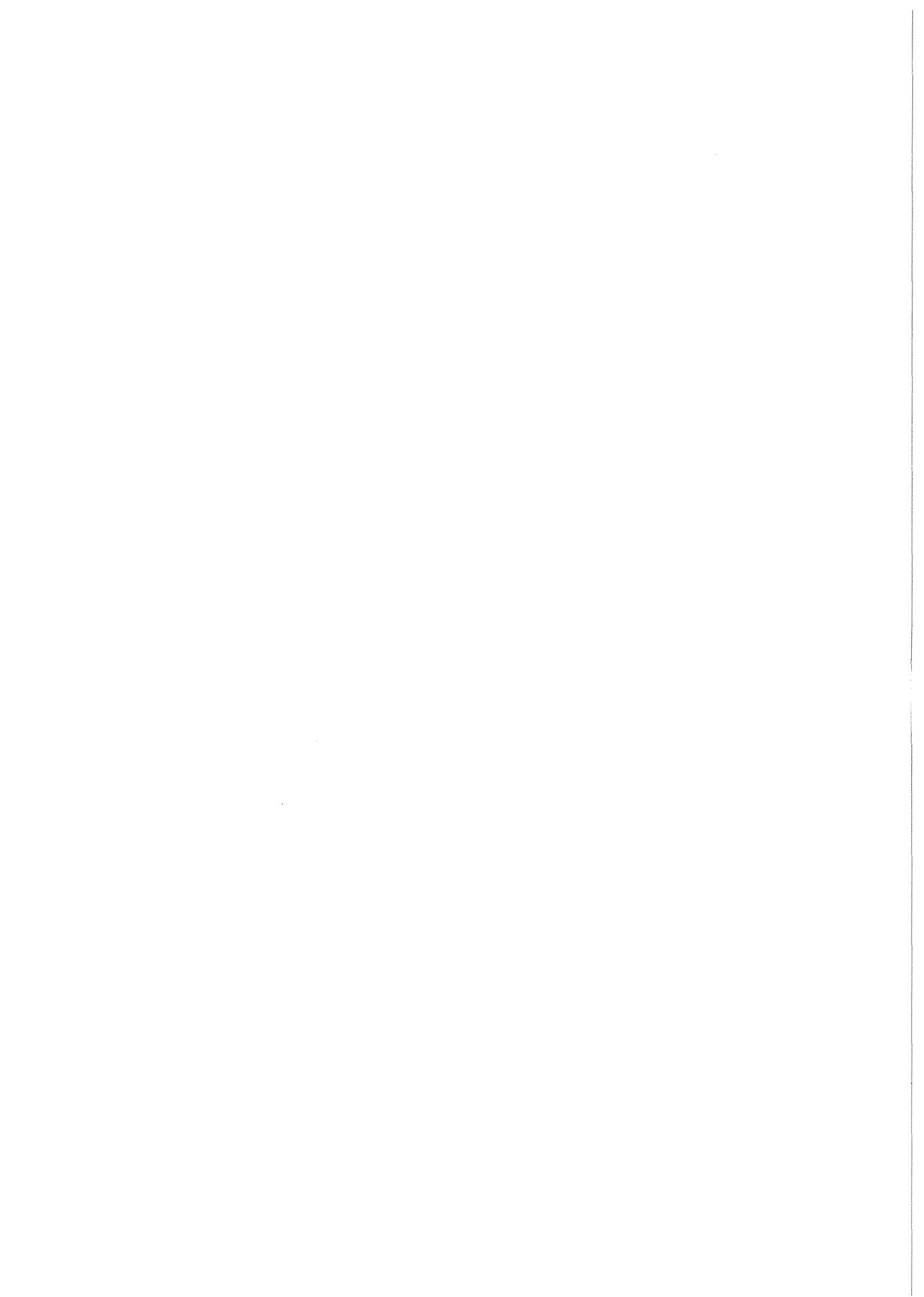
OPTIMA II

Berechnung der optischen Eigenschaften unendlich langer Zylinder mit homogener Struktur

A. Bach, G. Metzger

Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARSLRUHE
Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik

KfK 4364

OPTIMA II

Berechnung der optischen Eigenschaften
unendlich langer Zylinder mit homogener Struktur

A. Bach, G. Metzger

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Ausgehend von dem Rechenprogramm OPTIMA zur Berechnung der Streueigenschaften einzelner Mie-Partikel mit homogener oder schalenförmiger Struktur wird eine Erweiterung zur Berechnung der Streueigenschaften von homogenen, unendlich ausgedehnten Zylindern eingeführt. Es werden die exakten Mie-Funktionen sowie deren Lösungen dargestellt. Die numerischen Lösungen für die komplexen Mie-Koeffizienten werden mit den exakten Werten verglichen. Alle abgeleiteten Größen können analog dem OPTIMA Rechenprogramm berechnet werden.

Abstract

OPTIMA II - Computation of the optical properties of homogeneous infinite cylinders

Based on the OPTIMA code for computation the scattering properties of single homogeneous or coated Mie-particles an expansion is introduced for computation the scattering properties of homogeneous infinite cylinders. The exact Mie-functions as well as their solutions are presented. The numerical solutions for the complex Mie-coefficients are compared with the exact values. All derived quantities can be calculated by analogy to the OPTIMA code.

Inhaltsverzeichnis

Seite

Zusammenfassung	
Liste der verwendeten Symbole	I
Einleitung	1
1 Problembeschreibung	2
2 Streueigenschaften einzelner Zylinder	3
3 Streueigenschaften von Polydispersionen	8
4 Rechenprozeduren und Rekursionsformeln	10
4.1 Abbruchkriterien	12
5 Rechengenauigkeit	14
5.1 Vergleich der Bessel- und Weberfunktionswerte	14
5.2 Vergleich der Mie-Koeffizienten mit realen Brechungsindizes	16
5.3 Vergleich der Mie-Koeffizienten mit imaginären Brechungsindizes	19
6 Ein- und Ausgabestruktur des Programms	24
6.1 Datenkarteneingabe	26
6.2 Flußdiagramm zum Programmablauf von OPTIMA II	30
7 Literaturverzeichnis	31

Liste der verwendeten Symbole

a_n, b_n	:	Mie - Koeffizienten n-ter Ordnung
$f()$:	Volumenstreuungsfunktion
i_1, i_2	:	Grad der linearen Polarisierung
i_3	:	Polarisationsebene
i_4	:	Elliptizität
m	:	komplexer Brechungsindex
r	:	Radius des Zylinders
x	:	Größenparameter des Zylinders
y	:	Größenparameter des Zylinders
E_1	:	Streuungsfeldkomponente senkrecht zur Streuebene
E_2	:	Streuungsfeldkomponente parallel zur Streuebene
$F_i()$:	Intensitätswirkungsfaktor
N	:	Anzahl der Partikeln
Q_a	:	Absorptionswirkungsfaktor
Q_e	:	Extinktionswirkungsfaktor
Q_s	:	Streuungsfeldwirkungsfaktor
$J_n()$:	Besselfunktionen der ersten Gattung von der Ordnung n
$Y_n()$:	" " " zweiten Gattung von der Ordnung n (sog. Weberfunktionen)
$H_n^{(2)}()$:	Besselfunktionen der dritten Gattung von der Ordnung n (sog. Hankelfunktionen zweiten Grades)
$J_n'()$:	Abl. der Besselfunktionen
$Y_n'()$:	Abl. der Weberfunktionen
$H_n^{(2)'}()$:	Abl. der Hankelfunktionen
$P_n()$:	Legendre-Polynome
α_a	:	Volumenabsorptionskoeffizient
α_e	:	Volumenextinktionskoeffizient
α_s	:	Volumenstreuungskoeffizient
δ	:	Zenitwinkel
λ	:	Wellenlänge

π	:	Zahl Pi
π_n, τ_n	:	Winkelkoeffizienten
σ	:	spektrale Streustrahlung
σ_a	:	Absorptionsquerschnitt
σ_e	:	Extinktionsquerschnitt
σ_s	:	Streuquerschnitt
ϕ	:	Azimutwinkel
θ	:	Streuwinkel
Ω	:	Raumwinkel
Re{ }	:	Realteil von
Im{ }	:	Imaginärteil von

IMSL : Maschineninterne Programmbibliothek der IBM M 3090

Einleitung

Die Theorie der Streuung einer elektromagnetischen Welle an zylinderförmigen Partikeln, die dieser Arbeit zugrundeliegt, ist u.a. bei van de Hulst (1957) und Kerker (1969) zusammengefaßt.

Die Übertragung dieser Theorie auf atmosphärische Bedingungen ermöglicht die Lösung der verschiedensten Problemstellungen beim Strahlungstransport, bei der Aerosolmeßtechnik, bei der Fernerkundung, usw. Die Wechselwirkung zwischen Aerosolen und elektromagnetischer Strahlung ist bis heute noch nicht vollständig erfaßt. Hier bietet das Rechenprogramm Unterstützung bei experimentellen Arbeiten.

Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt mit Hilfe von Besselfunktionen. Benötigt werden dabei Besselfunktionen erster Gattung, zweiter Gattung (sogenannte Weberfunktionen) und dritter Gattung (sogenannte Hankelfunktionen). Für die Berechnung der Besselfunktionen 1. Gattung, existiert ein maschineninternes Programm der IMSL, das jedoch nur für große Argumente ($x \geq 10$) genügend genau rechnet. Für kleine Argumente liefert diese Routine bei Ordnungen $n \geq 20$ Werte, die eine weitere Rechnung unmöglich machen. Berechnungen dieser Werte wurden in Optima II mit einer unendlichen Reihe erreicht.

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{z^2}{4}\right)^m}{m! (m+n)!}, \quad \text{mit } z \in \mathbb{C}$$

(Abramowitz-Stegun 1972)

1 Problembeschreibung

Bei den betrachteten Teilchen handelt es sich um unendlich lange zylinderförmige Partikeln aus homogenem Material. Unter der Annahme, daß die einfallende elektromagnetische Welle unpolarisiert und von der Größenordnung 1 ist, ergeben sich zwei Fälle, aus denen man die vorliegende Welle zusammensetzen kann. Falls nun die z-Achse mit der Zylinderachse zusammenfällt, gilt

- Fall 1 : Parallel polarisierte einfallende Strahlung - TM-Mode
- Es existiert kein z-Anteil des magnetischen Vektors

$$b_n = \frac{m J_n(x) J_n'(Y) - J_n(Y) J_n'(x)}{m J_n'(Y) H_n^{(2)}(x) - J_n(Y) H_n^{(2)'}(x)} \quad (1.1)$$

- Fall 2 : Senkrecht polarisierte einfallende Strahlung - TE Mode
- Es existiert kein z-Anteil des elektrischen Vektors

$$a_n = \frac{J_n(x) J_n'(Y) - m J_n'(x) J_n(Y)}{J_n'(Y) H_n^{(2)}(x) - m J_n(Y) H_n^{(2)'}(x)} \quad (1.2)$$

2 Streueigenschaften einzelner Zylinder

Die Mie-Streuung für Zylinder mit komplexen Brechungsindex ist ausführlich bei van de Hulst (1957) und Kerker (1969) beschrieben.

Das Streufeld einer elektromagnetischen Welle wird durch seine Komponenten senkrecht (E_1) und parallel (E_2) zur Streuebene beschrieben. Wenn die einfallende elektromagnetische Welle unpolarisiert und von der Größenordnung 1 ist, berechnet sich die Komponenten wie folgt:

$$E_1 = \frac{2 \pi}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \quad (2.1)$$

$$E_2 = \frac{2 \pi}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (b_n \pi_n + a_n \tau_n) \quad (2.2)$$

Die Winkelkoeffizienten sind definiert wie bei van de Hulst (1957). Aus den komplexen Mie-Streukoeffizienten a_n und b_n können alle abgeleiteten Größen berechnet werden.

Die Berechnung der Mie-Streukoeffizienten erfolgt durch die Gleichungen:

$$a_n = \frac{J_n(x) J'_n(Y) - m J_n(Y) J'_n(x)}{H_n(x) J'_n(Y) - m J_n(Y) H'_n(x)} \quad (2.3)$$

$$b_n = \frac{m J_n(x) J'_n(Y) - J_n(Y) J'_n(x)}{m H_n(x) J'_n(Y) - J_n(Y) H'_n(x)} \quad (2.4)$$

Dabei sei der Brechungsindex m
 die Argumente x und $y = mx$
 die Besselfunktionen J_n der Ordnung n
 und die Hankelfunktion $H_n^{(2)}$ der Ordnung n komplex.

Für die Hankelfunktionen gilt

$$H_n^{(2)}(x) = J_n(x) - i Y_n(x)$$

mit der Weberfunktion Y_n

Die Winkelkoeffizienten (def. bei van de Hulst 1957) sind nur vom Streuwinkel abhängig. Sie lassen sich mit Hilfe der legendre'schen Polynome bestimmen.

$$\pi_n = \frac{d P_n(\cos \theta)}{d \cos \theta} = \pi_n(\cos \theta) \quad (2.5)$$

$$\tau_n = \cos \theta \pi_n(\cos \theta) - \sin^2 \theta \frac{d \pi_n(\cos \theta)}{d \cos \theta} \quad (2.6)$$

Mit Kenntnis aller Größen aus den Gleichungen (2.1) und (2.2) sind die folgenden abgeleiteten Größen leicht zu berechnen.

$$i_1(m, x, \theta) = (2\pi/\lambda)^2 |E_1|^2 = (2\pi/\lambda)^2 E_1 E_1^* \quad (2.7)$$

$$i_2(m, x, \theta) = (2\pi/\lambda)^2 |E_2|^2 = (2\pi/\lambda)^2 E_2 E_2^* \quad (2.8)$$

$$i_3(m, x, \theta) = (2\pi/\lambda)^2 \operatorname{Re}(E_1 E_2^*) \quad (2.9)$$

$$i_4(m, x, \theta) = (2\pi/\lambda)^2 \operatorname{Im}(E_1 E_2^*) \quad (2.10)$$

E_1^* und E_2^* sind die konjugiert komplexen zu E_1 und E_2 . i_1 und i_2 normalisiert mit $(2\pi/\lambda)^2$ repräsentiert die Intensitäten der Streuquelle (Fluß pro Einheitsraumwinkel) unter der Annahme von unpolarisiert einfallendem Fluß von zwei Einheiten.

i_3 und i_4 stehen im Zusammenhang mit den Stokes-Parametern. i_3 gibt die Polarisationssebene und i_4 die Elliptizität an.

Die spektrale Streustrahlung, d.h. die gestreute spektrale Streuintensität pro Einheitsraumwinkel, ist:

$$\text{Spektrale Streustrahlung} = \frac{|E_1|^2 + |E_2|^2}{2} \quad (2.11)$$

Unter der Bedingung von unpolarisiert einfallendem Fluß der Größenordnung 1, beschreibt die spektrale Streustrahlung den Anteil der Strahlung der unter dem Streuwinkel θ in den Einheitsraumwinkel hineingestreut wird. Dieser Anteil wird durch den differentiellen Streuquerschnitt beschrieben.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|E_1|^2 + |E_2|^2}{2} \quad (2.12)$$

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (2.7) und (2.8) kann der differentielle Streuquerschnitt mit den Intensitätsparametern ausgedrückt werden.

$$\frac{d\sigma(m, r, \lambda, \theta)}{d\Omega} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 \frac{i_1(m, x, \theta) + i_2(m, x, \theta)}{2} \quad (2.13)$$

Da der differentielle Streuquerschnitt mit wachsendem Größenparameter schnell

große Werte annimmt, wird er auf den geometrischen Querschnitt des Zylinders bezogen. Die so erhaltene dimensionslose Größe wird als Intensitätswirkungsfaktor bezeichnet. Diese hat den gleichen Wert wie das Verhältnis von der aus dem Einheitsraumwinkel in Richtung θ gestreuten Energien zum geometrischen Querschnitt des Partikels.

$$F_i(m, x, \theta) = \frac{1}{\pi r^2} \frac{d\sigma(m, r, \lambda, \theta)}{d\Omega} \quad (2.14)$$

$$= \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{\pi r^2} \frac{i1(m, x, \theta) + i2(m, x, \theta)}{2} \quad (2.15)$$

Den Streuquerschnitt eines Zylinders erhält man durch Integration des differentiellen Streuquerschnitts über alle Streuwinkel, d.h. alle Raumwinkel. Aus Gründen der Orthogonalität kann das Integral durch eine unendliche Reihe ersetzt werden.

$$\sigma_s(m, r, \lambda) = \int_{\phi=0}^{4\pi} \int_{\delta=0}^{\pi} \frac{d\sigma(m, r, \lambda, \theta)}{d\Omega} \sin\delta \, d\delta \, d\phi \quad (2.16)$$

$$= \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left[|a_n|^2 + |b_n|^2 \right] \quad (2.17)$$

Den dimensionslosen Streuwirkungsfaktor erhält man wiederum durch Division des Streuquerschnitts des Zylinders durch seinen geometrischen Querschnitt.

$$Q_S(m, x) = \frac{1}{\pi r^2} \sigma_S(m, r, \lambda) \quad (2.18)$$

In ähnlich einfacher Weise lassen sich auch die entsprechenden Größen für die Extinktion finden:

$$\sigma_e(m, r, \lambda) = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) \operatorname{Re} (a_n + b_n) \quad (2.19)$$

und

$$Q_e(m, r, \lambda) = \frac{1}{\pi r^2} \sigma_e(m, r, \lambda) \quad (2.20)$$

Die entsprechenden Größen für die Absorption bestimmen sich aus den obigen Angaben, da folgende Beziehung gilt:

$$\text{Extinktion} = \text{Streuung} + \text{Absorption} \quad (2.21)$$

3 Streueigenschaften von Polydispersionen

Polydispersionen von Zylindern sind zu behandeln wie Polydispersionen von homogenen Kugeln. Man erhält die optischen Eigenschaften von Polydispersionen durch Summation der optischen Eigenschaften aller Zylinder.

Der pro Einheitsweglänge in die Richtung Θ pro Einheitsraumwinkel gestreute Anteil der Energie parallel einfallender Strahlung wird als Volumenstreuungsfunktion bezeichnet:

$$f(m, \lambda, \Theta) = \int_0^{\infty} \frac{d\sigma(m, r, \lambda, \Theta)}{d\Omega} \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.1)$$

$dN(r)/dr$ bezeichnet die Zylinderanzahlverteilung.

Mit Gleichung (2.14) vereinfacht sich die obige Beziehung

$$f(m, \lambda, \Theta) = \int_0^{\infty} F_i(m, x, \Theta) \pi r^2 \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.2)$$

In analoger Weise wird der Volumenstreuungskoeffizient durch Integration der Volumenstreuungsfunktion über alle Streuwinkel definiert.

Einfacher läßt er sich jedoch aus dem Streuquerschnitt der einzelnen Partikeln bestimmen:

$$\alpha_s(m, \lambda) = \int_{\text{Zylinder}} f(m, \lambda, \Theta) d\Omega \quad (3.3)$$

$$= \int_0^{\infty} \sigma_s(m, r, \lambda) \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.4)$$

$$= \int_0^{\infty} Q_s(m, x) \pi r^2 \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.5)$$

Für den Volumenextinktions- und Volumenabsorptionskoeffizient lassen sich die gleichen Aussagen machen:

$$\alpha_e(m, \lambda) = \int_0^{\infty} \sigma_e(m, r, \lambda) \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.6)$$

$$= \int_0^{\infty} Q_e(m, x) \pi r^2 \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.7)$$

$$\alpha_a(m, \lambda) = \int_0^{\infty} \sigma_a(m, r, \lambda) \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.8)$$

$$= \int_0^{\infty} Q_a(m, x) \pi r^2 \frac{dN(r)}{dr} dr \quad (3.9)$$

4 Rechenprozeduren und Rekursionsformeln

Im Rechenprogramm werden die optischen Eigenschaften von einzelnen Partikeln berechnet. Die optischen Eigenschaften von Zylinderpolydispersion werden entsprechend ihrer Anzahlverteilung additiv zusammengesetzt.

Für die Berechnung der Mie-Koeffizienten der n-ten Ordnung ist es vorher nötig, die Bessel-, Weber- und Hankelfunktion bis mindestens ebenfalls zur n-ten Ordnung bereitzustellen. Von mehreren möglichen Rekursionsformeln zur Berechnung dieser Funktionen (Abramowitz und Stegun, 1972) sind folgende ausgewählt worden. Das Kriterium war allein die Gültigkeit auch für komplexe Argumente.

Für die Besselfunktion gilt:

$$J_n(Z) = \left(\frac{Z}{2}\right)^n \sum_{m=0}^{\infty} \left(-\left(\frac{Z}{2}\right)^2\right)^m \frac{1}{(m! \Gamma(n+m+1))^{-1}} \quad (4.1)$$

für ganzzahlige n ist

$$\Gamma(n+m+1) = (n+m)!$$

damit ergibt sich für (4.1)

$$J_n(Z) = \left(\frac{Z}{2}\right)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(-\left(\frac{Z}{2}\right)^2\right)^m}{m! (m+n)!} \quad (4.2)$$

Für die Weberfunktion gilt:

$$Y_0(Z) = \frac{2}{\pi} \left(\gamma + \ln \frac{Z}{2} \right) J_0(Z) - \frac{4}{\pi} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i} J_{2i}(Z) \quad (4.3)$$

$$\text{für } Y_1(Z) : \frac{2}{\pi Z} (J_1(Z) Y_0(Z) - Y_1(Z) J_0(Z)) = 0 \quad (4.4)$$

Y_0 und Y_1 sind Startwerte für die Rekursionsformel

$$Y_{n+1}(Z) = \frac{2n}{Z} J_n(Z) - Y_{n-1}(Z) \quad (4.5)$$

Aus den Besselfunktionen und der Weberfunktionen werden dann die Werte für die Hankelfunktionen berechnet.

Für die Hankelfunktion 2. Art gilt:

$$H_n^{(2)}(Z) = J_n(Z) - i Y_n(Z) \quad (4.6)$$

Weiterhin ist es für die Mie-Koeffizienten notwendig, die Ableitungen aller Funktionen zur Verfügung zu haben. Die Ableitungen dieser Funktionen berechnet sich wie folgt:

$$J_n'(Z) = 1/2 \left(J_{n-1}(Z) - J_{n+1}(Z) \right) \quad (4.7)$$

$$Y_n'(Z) = 1/2 \left(Y_{n-1}(Z) - Y_{n+1}(Z) \right) \quad (4.8)$$

$$H_n^{(2)'}(Z) = J_n'(Z) - i Y_n'(Z) \quad (4.9)$$

Die Besselfunktionen mit komplexen Argumenten stellen an die Rechengenauigkeit hohe Anforderungen, d.h. 10 Stellen. Bei nicht ausreichender Rechengenauigkeit treten wegen der häufigen Differenzbildungen Fehler bei der Berechnung der Mie-Koeffizienten auf. Je größer dabei das Argument ist, desto größer wird der Fehler.

Durch besondere Vorkehrungen läßt sich diese Fehlerquelle einschränken, d.h. zu noch höheren Argumenten verschieben. Es gibt also ein maximales Argument, für welches die Berechnungen der unendlichen Reihen noch korrekte Werte liefern.

Bei IBM kompartiblen Datenverarbeitungsanlagen müssen die Operationen unbedingt doppelt genau durchgeführt werden. Eine weitere Fehlerquelle kann durch konsequente Benutzung des doppelt genauen Datentyps und der doppelt genauen maschineninternen Funktionen vermieden werden. So hat es sich gezeigt, daß auch Konstanten doppelt genau eingegeben werden müssen.

4.1 Abbruchkriterien

Bei der numerischen Berechnung der Besselfunktion mit den unendlichen Reihen Gl (4.1) und Gl (4.2) ist zu beachten, daß die Reihenglieder sowie die Vorfaktoren, Dimensionen annehmen können, die die Rechnerkapazität übersteigen. Dies tritt bei den Vorfaktoren

$$R = \left(\frac{z}{2} \right)^n$$

bei großen Argumenten z und hohen Ordnungen n auf. Die Berechnung der Besselfunktionen wird abgebrochen, wenn der Vorfaktor größer $1 \cdot 10^{65}$ wird. Ebenso wird die Berechnung abgebrochen, wenn die Teilsummanden

$$L_m = (-1)^m \frac{R \cdot K_m}{m^2 + m \cdot n} \quad \text{mit } K_m = \frac{K_{m-1}}{m^2 + m \cdot n}$$

kleiner als $1 \cdot 10^{-75}$ werden.

Bei der Programmierung der Weberfunktion wird der Startwert Y_0 ebenfalls mit einer unendlichen Reihe berechnet. Die Anzahl der Reihenglieder ist nach Gl. (4.3) von der Ordnung der Besselfunktion abhängig. Wenn n die höchste Ordnung ist, so bricht die Reihe nach $\text{INT } \frac{n}{2}$ ab.

5 Rechengenauigkeit

Bei dem Programm OPTIMA II, insbesondere bei der Berechnung der Bessel- und Weberfunktionen, war auf eine hohe Genauigkeit der Werte zu achten, da es ansonsten bei der Berechnung der Mie-Koeffizienten zu erheblichen Fehlern gekommen wäre. Im folgendem stehen Vergleichstabellen, die als Qualitätskontrolle dienen. Als Vorlage wurden die Tabellenwerte von Libelo (1962 a, b) Larkin-Churchill (1959), v.d. Hulst (1957) und Abramowitz-Stegun (1972) verwendet. Da diese aber nur für niedrige Ordnungen und kleine Argumente Mie-Koeffizienten, bzw. beschränkt Bessel- und Weberfunktionen, berechneten, waren auch nur in diesem Rahmen Vergleiche möglich.

5.1 Vergleich der Bessel- und Weberfunktionswerte

Die Tab. 5.1.1. gibt den Vergleich der berechneten Werte mit denen aus Abramowitz-Stegun (1972) an. Sie gibt die Anzahl der übereinstimmenden, geltenden Ziffern an. Der erste Wert gilt für die Besselfunktionswerte, der zweite für die Weberfunktionswerte.

Da im Abramowitz-Stegun (1972) nur für vereinzelte Argumente Vergleichswerte vorhanden sind, kann man aus der hohen Genauigkeit der verglichenen Werte, die der Anderen gut extrapolieren.

Tabelle 5.1.1 Vergleich der Bessel- und Weberfunktionswerte mit Werten aus Abramowitz-Stegun (1972)

Argumente Ordnung	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	20	50	100
0	10/8*	10/9*	10/10	10/9*	10/9	10/10	10/9*	10/10	10/10	10/9*		10/10	10/10
1	10/10	10/10	10/10	10/9*	10/10	10/10	*8/10	10/10	10/10	10/10		10/10	10/10
2	10/10	10/10	10/8*	10/9*	10/10	10/5*	10/7*	10/8*	10/7*	10/5*		10/10	10/10
3	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	5*/5*	5*/5*	5*/5*	10/10	4*/4*	10/10	10/10
4	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	5*/5*	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	10/10	10/10
5	10/10	10/9	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	5*/4*	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	10/10	10/10
6	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	5*/5*	5*/4*	5*/5*	10/10	4*/5*	10/10	10/10
7	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	5*/5*	5*/5*	5*/4*	10/7	5*/3*	10/10	10/10
8	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	9/10	5*/5*	5*/5*	5*/5*	5*/5*	10/10	4*/5*	10/10	10/10
9	10/10	10/10	5*/5*	5*/5*	9/10	5*/5*	5*/5*	5*/5*	5*/5*	10/10	5*/5*	10/10	10/10
10	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
11	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
12	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
13	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
14	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
15	10/10	10/9			10/10					10/10		10/10	10/10
16	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
17	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
18	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
19	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
20	10/10	10/10			10/10					10/10		10/10	10/10
30	10/10	9/10			10/9					10/10		10/10	10/10
40	10/10	10/9			10/9					10/10		10/10	10/10
50	k/k	10/9			10/9					5/10		10/10	10/10
100	k/k	k/k			k/k					k/k		8/10	10/10

* = Genauigkeit der berechneten Werte ist größer als Tabellenwerte (Rundung)

k = Berechnung wegen Abbruchskriterien nicht möglich

5.2 Vergleich der Mie-Koeffizienten mit realen Brechungsindizes

Tab. 5.2.1 enthält als Werte die Anzahl der übereinstimmenden geltenden Ziffern, wie bei dem Vergleich der Bessel- bzw. Weberfunktionen.

Die Mie-Koeffizienten wurden bei Larkin-Churchill (1959) mit 4 Stellen hinter dem Komma in $1 \cdot 10^0$ Darstellung gelistet. Bei Libelo (1962 b) sind die Werte mit 7 Stellen (h.d.K.) in $1 \cdot 10^0$ Darstellung gelistet.

Beide Vorlagen stimmten weitgehend überein, sodaß wir mit Libelo verglichen. Die Werte zeigten keine außergewöhnlichen Differenzen. Die Übereinstimmung lag bei 5 Ziffern, da Libelo nur bis 7 Stellen berechnet hat und keine Rundung vornahm.

Die Tabelle zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der berechneten Werte.

Tab. 5.2.1a: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962)

m	1,5																													
x	0,5		1,0				1,5				2,0					3,0						4,0								
n	0	1	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	7
Re An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Re Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Tab. 5.2.1b: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962)

m	2,0																													
x	0,5		1,0				1,5				2,0					3,0						4,0								
n	0	1	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	5	0	1	2	3	4	5	6	7	
Re An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Re Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Tab. 5.2.1c: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962)

m	2,5																											
x	0,5		1,0			1,5				2,0				3,0						4,0								
n	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	7
Re An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im An	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Re Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Im Bn	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

5.3 Vergleich der Mie-Koeffizienten mit imaginären Brechungsindizes

Die Tabelle 5.3.1 enthält als Werte die Anzahl übereinstimmender, geltender Ziffern mit den Tabellenwerten aus Libelo (1962a). Da Libelo die Werte in $1 \cdot 10^0$ Darstellung gelistet hat, sind bei höheren Ordnungen weniger Ziffern vorhanden, die man vergleichen könnte. Die Übereinstimmung ist jedoch bei verglichenen Werten der Argumente $x = 5.5$ und 10.375 noch größer als 4 Ziffern.

Die Tabelle 5.3.2 enthält also Werte die prozentuale Abweichung zu den Vergleichswerten von Libelo, da zum Teil Differenzen existieren bei denen ein Ziffernvergleich sinnlos wäre.

In Tabelle 5.3.3 wurde für Argument $x = 5.5$ das gleiche Verfahren wie in Tab. 5.3.1 und für $x = 10.00$ das aus 5.3.2 angewandt. Tabelle 5.3.4 gibt einen Vergleich mit den Werten aus v.d. Hulst für Brechungsindizes $m = 1.4 - i1.4$.

Insgesamt kann aus diesen Qualitätskontrollen der Schluß gezogen werden, daß mit OPTIMA II hinreichend genaue Werte berechnet werden. Größere Abweichungen können einerseits durch ungenügende Genauigkeit der Vergleichstabellenwerte entstanden sein, oder durch ungenaue Rechnung bei zu kleinen Werten in OPTIMA II.

Tab. 5.3.1: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962) und Larkin-Churchill (1959)

m	1,4 - i0,5																															
x	5,5												10,375																			
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Re An	5	6	6	6	5	7	5	6	5	4	3	2	7	5	6	6	6	6	6	7	6	7	7	6	5	6	5	4	3	2	1	0
Im An	5	5	5	5	4	5	5	5	6	5	4	2	6	5	6	5	6	6	6	5	6	6	6	6	6	5	5	4	4	3	2	1
Re Bn	6	5	6	6	6	6	7	6	5	3	2	1	6	7	6	7	6	6	6	7	7	6	7	6	4	6	5	4	3	2	1	0
Im Bn	4	5	7	4	5	5	6	6	5	4	3	2	7	6	6	6	5	7	6	7	4	7	6	6	5	5	5	4	3	2	1	0

Tab. 5.3.2a: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962) und Larkin-Churchill (1959)

m	1,4 - i 1,4											
x	5,5											
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Re An	0,32	-0,81	0,16	0,27	-0,77	-0,17	0,24	0,02	-0,73	-1,11	-1,29	-1,68
Im An	-0,69	-1,30	8,70	1,27	-0,21	3,18	16,16	3,52	1,60	1,05	0,85	0,64
Re Bn	-0,78	0,32	-0,58	-0,16	0,27	0,38	0,28	0,30	0,59	0,90	1,10	0,22
Im Bn	-0,31	-0,69	-24,24	0,88	-0,37	0,36	0,64	0,96	1,28	1,51	1,61	2,86

- 21 -

Tab. 5.3.2b: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962) und Larkin-Churchill (1959)

m	1,4 - i 1,4																			
x	10,825																			
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Re An	0	-0,03	0,26	-0,33	0,43	-0,75	-0,05	0,47	-0,28	-0,66	-0,17	0,25	0,50	0,26	-0,35	-0,75	-0,96	-1,08	-0,93	0
Im An	1,86	1,63	1,17	0,71	0,16	-2,29	1,80	0,29	6,06	0,34	5,97	-5,24	-7,06	8,25	2,89	1,76	1,31	1,06	0,74	-
Re Bn	0,03	0	-0,10	0,41	-0,64	0,22	-0,90	-0,69	-0,04	0,22	0,32	0,28	0,14	0,11	0,24	0,41	0,57	0,77	0,92	0
Im Bn	2,22	0,98	1,23	0,68	0,10	-2,26	1,03	-0,09	-0,34	0,21	0,40	0,56	0,74	0,81	0,93	0,98	0,98	1,35	0,98	0

Tab. 5.3.3a: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962) und Larkin-Churchill (1959)

m	1,5 - i 3,1											
x	5,50											
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Re An	6	6	5	6	5	5	6	5	6	5	3	2
Im An	5	5	5	6	6	6	6	6	6	5	4	3
Re Bn	5	6	6	5	6	5	6	6	5	4	3	2
Im Bn	5	5	6	6	5	6	6	6	6	5	4	2

Tab. 5.3.3b: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus Libelo (1962) und Larkin-Churchill (1959)

m	1,5 - i 3,1																		
x	10,00																		
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Re An	-0,64	-0,18	-0,67	0,0	0,65	0,52	0,17	-0,66	-1,32	0,77	-0,22	0,19	-1,72	3,4	-3,68	4,65	-4,22	5,02	7,27
Im An	-0,45	0,53	-1,06	-19,47	0,73	-0,05	-1,8	-0,77	-1,64	-0,78	3,08	-4,34	1,50	-0,49	0,21	-0,42	0,38	-0,60	2,56
Re Bn	-0,22	-0,61	-0,13	-0,15	0,14	0,37	0,90	-0,20	-0,12	0,26	-0,17	-0,54	1,68	-3,62	3,87	-6,07	5,48	-11,13	-
Im Bn	0,66	-0,44	0,81	-12,78	-0,64	0,04	1,31	0,34	0,99	0,27	-0,31	0,44	-0,49	0,59	-0,62	0,59	-0,59	-0,78	5,00

Tab. 5.3.4a: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus van de Hulst (1957)

m	1,4 - 1,4															
x	0,4		0,6			0,8			1,0				1,4			
n	0	1	0	1	2	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3
Re An	(1,33)	(-1,04)	1,57	-0,64	(16,67)	1,31	-0,61	(8,20)	0,99	-0,20	-1,00	0,60	0,66	-0,36	(-29,6)	(0,0)
Im An	(18,00)	(-4,30)	2,55	1,09	(17,70)	1,47	1,21	(12,43)	1,36	1,06	1,10	0,60	0,77	0,54	(-20,0)	(4,2)
Re Bn	(-1,74)	(1,32)	0,91	1,57	(-34,00)	0,68	1,31	(13,33)	0,51	0,99	1,48	7,94	0,16	0,66	(91,2)	(-)
Im Bn	(13,80)	(18,0)	0,12	2,55	(-15,00)	0,17	1,47	(-0,67)	0,78	1,36	0,79	-11,1	2,94	0,77	(9,7)	(-)

Tab. 5.3.4b: Vergleich der Mie-Koeffizienten komplexer Brechungsindizes mit Werten aus van de Hulst (1957)

m	1,4 - i 1,4																	
x	2,0					3,0						4,0						
n	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	5	0	1	2	3	4	5	6
Re An	0,43	-0,77	-0,09	-0,48	-1,01	-0,10	0,36	-0,73	0,02	-0,14	-1,10	-0,79	0,22	0	-0,6	0,02	0,03	-17,4
Im An	0,04	0,87	1,69	1,67	0,74	1,28	0,89	0,14	2,69	2,35	1,35	-1,30	-4,63	1,96	0,58	4,23	3,41	19,5
Re Bn	-0,43	0,44	0,54	0,93	2,96	1,62	0,10	0,42	0,42	0,73	1,29	0,35	-0,79	0,03	0,39	0,36	0,41	20,8
Im Bn	0,50	0,04	0,94	1,42	2,13	2,31	1,28	0,07	0,68	1,18	0	-0,55	-1,30	2,35	0,12	0,58	0,99	19,6

6 Ein- und Ausgabestruktur des Programms

Alle zur Berechnung notwendigen externen Größen werden dem Programm per Datenkarten mitgeteilt. Dabei können die Variablen entsprechend der gestellten Aufgaben verschiedene Werte annehmen. Außerdem ist darauf zu achten, daß für das Kugelprogramm ein anderer Datensatz notwendig ist als für das Zylinderprogramm. Dieser ist der Beschreibung OPTIMA (Metzig, 1984) zu entnehmen.

Tab. 6.1.1: Steuerung des Ausdrucks mittels der Variablen "AUSDRU" und "BNDART"

"AUSDRU" "BNDART"	KURZ	NORM	LANG	ELANG
KEINP	Q_a, Q_e, Q_s keine Phasen- funktion	-	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$
ENG	Q_a, Q_e, Q_s Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s $(i_1 + i_2)/2$ Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ $(i_1 + i_2)/2$ Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ $(i_1 + i_2)/2$ Mie- Amplituden Phasen- funktion
I1234	Q_a, Q_e, Q_s Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s i_1, i_2 i_3, i_4 $(i_1 + i_2)/2$ Polarisations grad, Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ i_1, i_2 i_3, i_4 $(i_1 + i_2)/2$ Polarisations grad, Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ i_1, i_2 i_3, i_4 $(i_1 + i_2)/2$ Polarisations grad, Mie- Amplituden, Phasen- funktion

6.1 Datenkarteneingabe

1. Datenkarte:

Problem	F = (1, 2)
1	Kugelprogramm
2	Zylinderprogramm

2. Datenkarte:

"BNDART" : Form des Ausdrucks (entsprechend der Angaben in Tabelle 6.1.1)
=> "KEINP", "ENG", "I1234"

"AUSDRU" : Form des Ausdrucks (siehe Tabelle 6.1.1)
=> "KURZ", "NORM", "LANG", "ELNG"

"INTEGR" : Integration über eine Anzahlverteilung
=> "JA", "NEIN"

"PLATTE" : Formatfreies Schreiben von Daten auf UNIT 7
=> "JA", "NEIN"

"DRUPLO" : Druckerplot der Phasenfunktion
=> "JA", "NEIN"
WENN "JA", DANN MUSS AUCH "INTEGR" DEN WERT "JA" ANNEHMEN

"IKURV" : Anzahl der Phasenfunktionen in einem Plot

"IVERT" : Anzahl der zu integrierenden Verteilungsfunktionen
für einen vorgegebenen Partikelgrößenbereich
=> >0

3. Datenkarte:

"IANZ" : Anzahl der verschiedenen Streuwinkelintervalle

0: = Standardverteilung: 0. (0.2) 2.
 3. (1.0) 10.
 12. (2.0) 170.
 171. (1.0) 180.

>0: Anzahl der Intervalle

Es folgen "IANZ-Datenkarten mit je

"ANF" : 1. Streuwinkel im Intervall

"DELTA" : Schrittweite

"END" : Letzter Streuwinkel im Intervall

nächste Datenkarte:

"TEXT" : Hier kann ein Text von max. 72 Zeichen eingegeben werden,
 der im Ausdruck erscheint.

nächste Datenkarte:

"(ReBRECHM, - Im BRECHM)": komplexer Brechungsindex des Materials

"WELLE" : Wellenlänge in μm

nächste Datenkarte: (Dieser Zyklus entfällt, wenn "INTEGR" den Wert "NEIN" annimmt).

"IAM" : Anzahl der Moden der Verteilungsfunktion
=> 0: keine Verteilungsfunktion
1: Verteilungsfunktion nach Shettle und Fenn (1975)
2...5: 5 ist maximaler Wert

Es folgen "IAM" - Datenkarten mit je:

"VCON1" : Konstante 1 für die Verteilungsfunktion
"VCON2" : Konstante 2 für die Verteilungsfunktion
"VCON3" : Konstante 3 für die Verteilungsfunktion
"VCON4" : Konstante 4 für die Verteilungsfunktion

nächste Datenkarte

"IANZ" : Anzahl der Größenparameterintervalle
=> 0: Automatische Einteilung $\Delta = 0.05 \times$
Setzen von "AUSDRU" = "KURZ" (Wegen der vielen
Intervalle wären sonst Unmengen an Ausdruck
zu erwarten)
"DELTA" wird nicht eingelesen!!!
>0: Anzahl der Intervalle

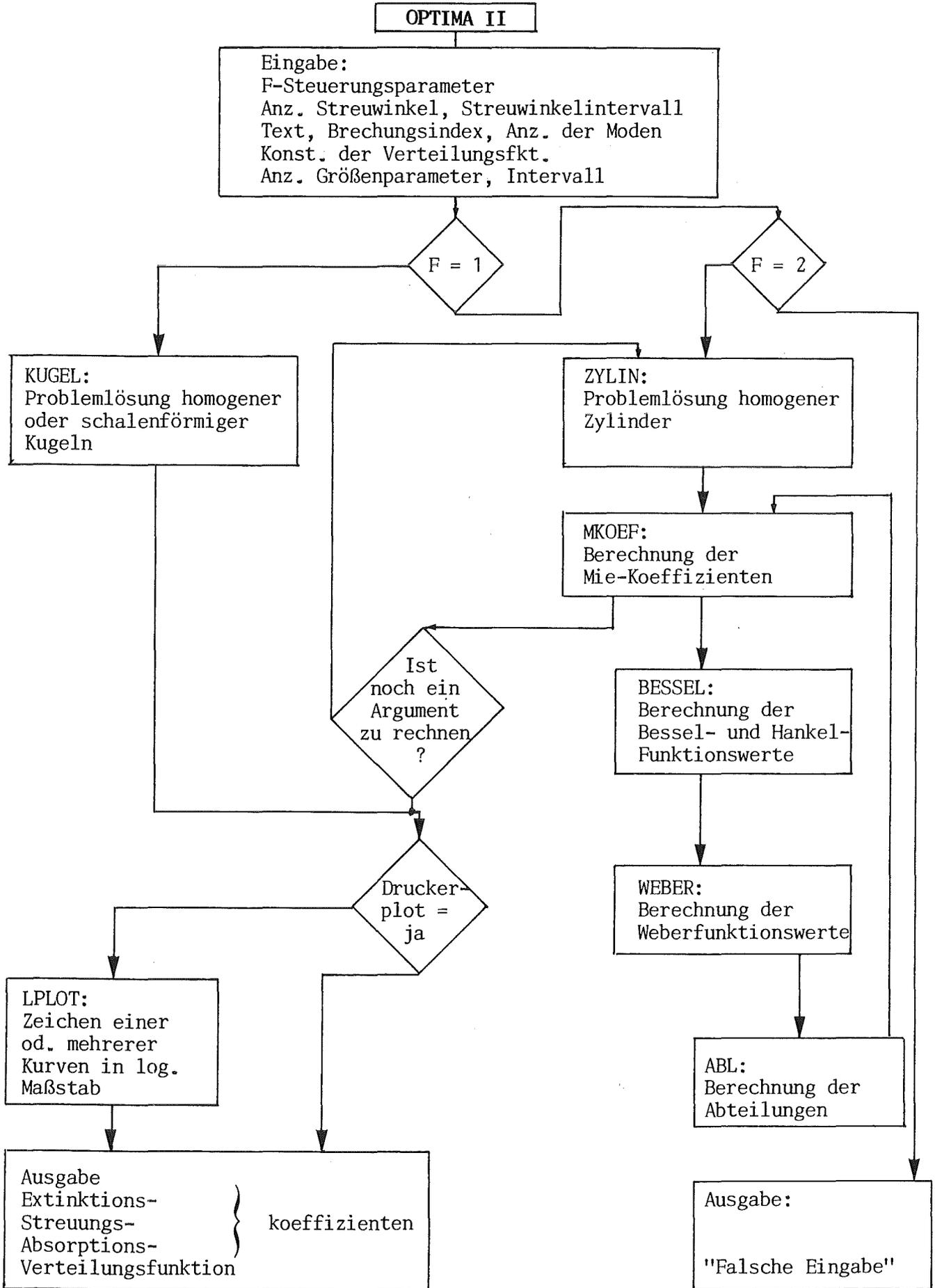
Es folgen "IANZ"-Datenkarten, jedoch mindestens eine, mit je:

"ANF" : 1. Größenparameterwert im Intervall
"DELTA" : Schrittweite
"END" : letzter Größenparameterwert im Intervall

Der Ausdruck wird über die Variablen "BNDART" und "AUSDRU" gesteuert. Darüber hinaus werden auch alle anderen notwendigen Angaben ausgedruckt, wie z.B. die Wellenlänge, die komplexen Brechungsindizes, die Verteilungsfunktion, und vieles mehr. Die Ausgabe von Daten auf UNIT 7 dient zur Bereitstellung der Ergebnisse für das sich möglicherweise anschließende Plotprogramm.

Das derzeitige Plotprogramm kann alle Ergebnisse verarbeiten, die in Abhängigkeit vom Größenparameter vorliegen. Die Achsenbeschriftungen werden vom Programm automatisch erzeugt, entsprechend dem Wertebereich der zu zeichnenden Variablen.

6.2 Flußdiagramm zum Programmablauf von OPTIMA II



7. Literaturverzeichnis

- Abramowitz, M. and Stegun, I.A., 1972: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, Inc., New York
- van de Hulst, H.C., 1957: Light Scattering by Small Particles, John Wiley & Sons, Inc., New York
- Kerker, M., 1969: The Scattering of Light, Academic Press, New York and London
- Larkin, B. und S. Churchill, 1959: Scattering and Absorption of Elektromagnetic Radiation by Infinite Cylinders, Journal of the Optical Society of Amerika; Vol. 49, Number 5
- Libelo, F.L., 1962:
Light Scattering by Partially Absorbing Cylinders - Coefficients
Noltr. 62-142
NS Naval Ordnance Laboratory
White Oak, Maryland
- Libelo, F.L., 1962 b:
Scattering of Light at Normal Incidence by Dielectric Cylinders With Refractive Index in the Range $m = 1.400$ to $m = 3.00$ -- Scattering Coefficients
Noltr. 62-161
NS Naval Ordnance Laboratory
White Oak, Maryland
- Metzsig, G., 1984: OPTIMA
Berechnung der optischen Eigenschaften einzelner Mie-Partikeln mit homogener oder schalenförmiger Struktur Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik, KfK-Bericht 3678