

О.М.Козаков¹, П.В.Полянський¹, Х.В.Фельде¹, О.О.Карташева²

¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

²Московський державний університет друку імені Фвана Федорова

СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОПТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФАРБОВИХ ШАРІВ

Запропоновано метод статистичного моделювання інтегральних і диференціальних оптичних характеристик фарбових шарів. Наведено результати розрахунку коефіцієнтів відбивання, поглинання, покривної здатності, глибинного розподілу поглинутої енергії для фарбових шарів на основі двоокису титану на підкладках з різною відбиваючою здатністю.

The technique for statistical simulation of integral and differential characteristics of paint layers has been proposed. We represent the computational results for indices of reflection, refraction as well as deep distribution of absorbed energy for paint layers on the base of titanium dioxide at substrates with various magnitudes of reflectivity.

Споживчі властивості друкарських фарб у великій мірі визначаються їхніми оптичними характеристиками. Проблема теоретичного передбачення цих характеристик фактично зводиться до розв'язання рівняння переносу випромінювання в поглинаючому й розсіюючому шарі [1]. Вихідними параметрами рівняння є оптичні параметри фарби: показник послаблення $\varepsilon = \alpha + \sigma$, де α - показник поглинання, σ - показник розсіювання; альbedo однократного розсіювання $\Lambda = \sigma / \varepsilon$; індикатриса розсіювання елементарного об'єму середовища $X(\gamma)$, де γ - кут розсіювання; товщина фарбового шару H . Розв'язку рівняння переносу в загальному виді дотепер не існує. Тому для знаходження оптичних характеристик світлорозсіюючих шарів використовують різного роду наближення. Стосовно до фарб звичайно використовують дво-, чотири- й багатопотокові наближення [2-4]. Найбільше поширення одержало двопотокове наближення, відоме як двопотокова, двопараметрична модель Гуревича-Кубелки-Мунка (ГКМ). Параметрами моделі є константи поглинання K і розсіювання S , які не відповідають параметрам α і σ , а співвідношення між ними дотепер остаточно не визначено. Відносна простота моделі ГКМ накладає ряд досить істотних обмежень на її застосування, які добре відомі [4]. Наприклад, одним з них є не врахування границі розділу між шаром і навколишнім середовищем. У зв'язку із цим доводиться перераховувати значення коефіцієнтів відбивання й пропускання за допомогою різного роду поправочних співвідношень (Сандерсона, Райда-Купера й ін.) [4,5]. Розрахунки виправлень у свою чергу вимагають знання коефіцієнта внутрішнього відбивання від границі розділу шару, який визначають досить апріорно. Незважаючи на це, з огляду, що лакофарбові шари звичайно мають значну оптичну товщину, зазначена модель дозволяє досить точно прогнозувати їх інтегральні оптичні характеристики. Однак при вирішенні ряду проблем важливо знати й диференціальні оптичні характеристики, наприклад, розподіл поглинутої енергії по товщині лакофарбового шару, кутовий розподіл коефіцієнта яскравості шару, роздільні значення коефіцієнтів поглинання пігменту й в'язучого тощо.

У роботі пропонується новий підхід до розв'язання проблеми прогнозування оптичних характеристик фарбових шарів [6], що заснований на використанні методу статистичного моделювання (метод Монте-Карло) поширення випромінювання у світлорозсіюючому шарі.

Статистичне моделювання поширення випромінювання в фарбовому шарі вимагає, в першу чергу, побудови оптико-геометричної моделі адекватної реальному покриттю. Розглянемо таку модель.

Фарбове покриття являє собою плоскопаралельний шар фарби товщини H . Він нанесений на непрозору підкладку з дифузним коефіцієнтом відбивання $R_{\text{під}}$ й індикатрисою яскравості $Y(\varphi)$, де φ - кут відбивання (розсіювання). Лакофарбовий шар складається із в'язучого з показником заломлення $n_B = n_{0,B} - i\chi_B$, у якому випадково розподілені частки пігменту, із середнім розміром d , функцією розподілу за розмірами $f(d)$, об'ємною концентрацією V_C і показником заломлення $n_{\text{пш}} = n_{0,\text{пш}} - i\chi_{\text{пш}}$. Потік випромінювання падає на покриття під кутом β відносно нормалі до поверхні в апертурному куті Ω_0 із заданим кутовим розподілом густини енергії $U(\Omega)$. Границя розділу «повітря-фарба» вважається гладкою. Для визначення значень кутів відбивання й заломлення, а також значення коефіцієнта відбивання від границі використаний закон Френеля. Відбивання на границі «підкладка-фарба» визначається видом індикатриси $Y(\varphi)$. Фарба, як світлорозсіююче середовище, характеризується такими оптичними параметрами: показником ослаблення - ε ($\varepsilon = \alpha + \sigma$), альbedo однократного розсіювання - $A = \sigma/\varepsilon$, індикатрисою розсіювання - $X(\gamma)$. Пігмент має показник поглинання $\alpha_{\text{п}}$, показник розсіювання $\sigma_{\text{п}}$, альbedo $A_{\text{п}} = \sigma_{\text{п}} / \varepsilon_{\text{п}}$, і індикатрису розсіювання $X_{\text{п}}(\gamma)$. Плівкоутворювач (в'язуче) вважається середовищем, що не розсіює світло, тому описується тільки показником поглинання - α_B . Таким чином, оптичні параметри фарби формуються в такий спосіб: $\alpha = \alpha_{\text{п}} + \alpha_B$, $\sigma = \sigma_{\text{п}}$, $\varepsilon = \alpha_{\text{п}} + \alpha_B + \sigma_{\text{п}}$, $A = \sigma_{\text{п}} / \varepsilon$, $X(\gamma) = X_{\text{п}}(\gamma)$. Фарбовий шар у цілому характеризується певними інтегральними і диференціальними характеристиками. До числа інтегральних відносять дифузний коефіцієнт відбивання R і коефіцієнт поглинання A . Диференціальні характеристики такі: розподіл поглинутої енергії по товщині шару (далі – глибинний розподіл поглинутої енергії) $A(H)$, коефіцієнт поглинання пігменту $A_{\text{п}}$, коефіцієнт поглинання в'язучого A_B , глибинний розподіл енергії, поглинутої пігментом $A_{\text{п}}(H)$, глибинний розподіл енергії, поглинутої в'язучим $A_B(H)$, індикатриса яскравості шару $B(\theta)$ і інші подібні.

Така модель не зовсім адекватна реальному фарбовому покриттю. Відомо, що до складу фарб поряд з пігментами можуть входити наповнювачі й ряд інших добавок [1-3,7]. Однак у першому наближенні для дослідження закономірностей формування оптичних характеристик подібне спрощення моделі цілком прийнятне.

Як відомо, метою статистичного моделювання є відтворення засобами обчислювальної техніки функціонування деякої імовірнісної моделі об'єкта [8]. Тому на основі створеної оптико-геометричної моделі фарбового шару необхідно побудувати відповідну статистичну модель. Побудова статистичної моделі фактично полягає у визначенні ряду імовірнісних характеристик, які описують акти взаємодії фотонів із частками, границями розділу середовищ і ділянки їхнього вільного пробігу між зіткненнями. Всі ці характеристики визначають за оптичними параметрами фарби й функціями, які визначають умови на границях розділу фарбового шару. До них відносять: імовірність поглинання кванта світла при

взаємодії із часткою пігменту $W_1(\alpha)=1-A$; функція розподілу імовірностей довжини вільного пробігу L кванта між взаємодіями з частками пігменту $W_2(L)$; імовірність виживання кванта при взаємодії з підкладкою $W_3(R_{\text{пцд}})=R_{\text{пцд}}$; імовірність виживання кванта при взаємодії із границею розділу «повітря-фарба» й «фарба-повітря» $W_4(R_{\text{ГР}})=R_{\text{ГР}}$, де $R_{\text{ГР}}$ - коефіцієнт відбивання від границі розділу, що визначається за поточним значенням кута падіння фотона на границю; функція розподілу імовірностей кутового відхилення фотона при зіткненні із часткою $W_5(\gamma)$; функція розподілу імовірностей кутового відхилення кванта при відбиванні від підкладки $W_6(\varphi)$; функція розподілу імовірностей кута падіння потоку випромінювання на шар $W_7(\Omega)$. За зазначеними імовірнісними функціями на комп'ютері моделюють поширення великої кількості пакетів фотонів у фарбовому шарі. Оцінка необхідних оптичних характеристик визначається вибіркою з відповідних масивів ваги пакетів.

Коефіцієнти поглинання плівкоутворювача A_B і пігменту $A_{\text{П}}$ одержують із відношення відповідної сумарної кількості поглинутих ваг до загальної початкової ваги всіх пакетів фотонів. Коефіцієнт відбивання покриття знаходять із відношення сумарної кількості ваг відбитих від границі «повітря-фарба» й таких, що пройшли через границю «фарба-повітря» з боку фарби до загальної початкової ваги всіх пакетів фотонів.

На жаль, у літературі відсутні відомості про оптичні параметри друкарських фарб. Якщо відомі перераховані вище структурні параметри й оптичні константи компонентів фарби, їх можна розрахувати за формулами Мі або безпосередньо виміряти використовуючи методи оптики світлорозсіюючих середовищ [1]. Тому нами в якості модельної фарби було взято білу фарбу на основі двоокису титану з малою концентрацією пігменту. Добре відомо, що товщина фарби на друкарських відбитках становить декілька мікрометрів. Але ми свідомо пішли на використання більш розбавленої фарби через те, що це дозволило отримувати більш однорідні за товщиною фарбові шари й точніше визначати їх товщини, що є надзвичайно актуальним при експериментальному визначенні оптичних параметрів фарби. Проведені експериментальні дослідження показали, що у видимій ділянці спектра величина показника послаблення змінюється в межах $\varepsilon = 0.9 \div 2.0 \text{ мкм}^{-1}$, а значення ймовірності поглинання кванта $\kappa = 1 - A = 10^{-3} \div 10^{-4}$. Тому для розрахунків оптичних характеристик були прийняті деякі усереднені величини: $\varepsilon = 1.5 \text{ мкм}^{-1}$ й $\kappa = 10^{-4}$. Вважали, що фарбові шари нанесені на чорну й білу підкладки з коефіцієнтами дифузного відбивання $R_{\text{пцд,ч}} = 5\%$ й $R_{\text{пцд,б}} = 85\%$ (відповідно до вимог стандарту на метод оцінки покривної здатності) і дифузною індикатрисою яскравості. Розрахунки проведені для випадку, коли випромінювання падає на шар перпендикулярно поверхні в апертурному куті $\Omega_0 = 10^0$. Показник поглинання в'язучого $\alpha_B = 2 \cdot 10^{-5} \text{ мкм}^{-1}$.

На рис. 1 наведені результати дослідження залежності дифузного коефіцієнта відбивання R і коефіцієнта поглинання A фарбових шарів від товщини покриття. Шари на чорній підкладці ($R_{\text{ч}}$, $A_{\text{ч}}$) мають менші значення зазначених коефіцієнтів у порівнянні із шарами на білій підкладці ($R_{\text{б}}$, $A_{\text{б}}$) у зв'язку з більш високим поглинанням самої підкладки. З ростом товщини покриття ця різниця зменшується, оскільки зменшується роль самої підкладки у формуванні світлового поля. При необхідності можуть бути розраховані роздільні коефіцієнти поглинання пігменту й в'язучого. Метод такого розрахунку детально описаний в [9].

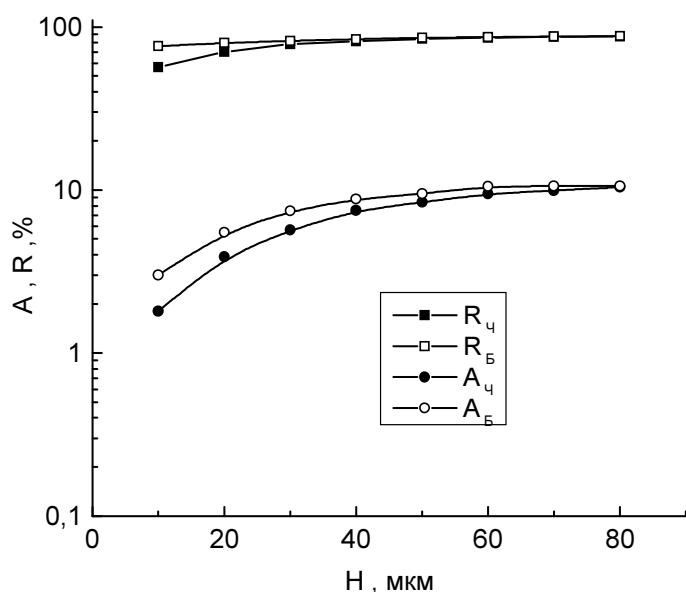


Рис.1. Залежність коефіцієнтів поглинання A та відбивання R від товщини фарбових шарів

Результати розрахунку дифузних коефіцієнтів відбивання можна використати для оцінки покривної здатності фарби. Як відомо за критерій укривання приймають значення коефіцієнта контрастності $C = R_q / R_b = 0.98$. На рис. 2 наведена залежність величини C від товщини покриття. Варіюючи величини оптичних параметрів фарби можна досить швидко встановити, по-перше, який з параметрів найбільше впливає на величину покривної здатності, й, по-друге, визначити оптимальну структуру самого покриття. Наприклад, розрахунками можна точно встановити припустимі межі відхилення значення коефіцієнта відбивання білої підкладки, які істотно не впливають на оцінку покривної здатності.

На рис.3 й 4 наведені результати моделювання однієї з диференціальних характеристик покриття - глибинного розподілу поглинутої енергії в дисперсій (пігмент) і дисперсійній (в'язуче) компонентах шару - на різних підкладках і при різній товщині шару фарби. У всіх випадках шар умовно поділений на 10 часткових шарів. Для зручності розгляду криві нормовані щодо енергії, поглинутої в першій, приповерхній зоні шару. Криві практично ідентичні для пігменту й в'язучого. Однак їхній градієнт істотно залежить від відбивної здатності підкладки. Біла підкладка забезпечує більш рівномірний розподіл поглинутої енергії. Лінійність кривих свідчить про те, що вона розподіляється фактично дотримуючись закону Бугера. Зменшення відбивання підкладки приводить до значної асиметрії розподілу, що росте в міру збільшення глибини. Поглинання в поверхневому шарі при $H=60$ мкм приблизно в 20 разів вище, ніж у нижньому. Такого роду розрахунки можуть бути корисні, наприклад, при дослідженні закономірностей, пов'язаних з вивченням процесів фототвердження, світлостійкості різного роду фарбових шарів.

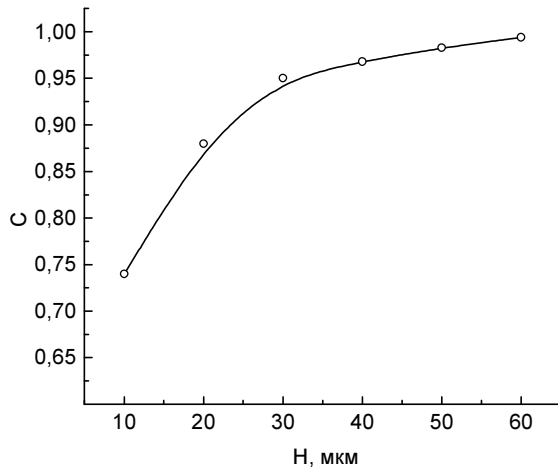


Рис.2. Залежність коефіцієнта контрастності C від товщини фарбового шару

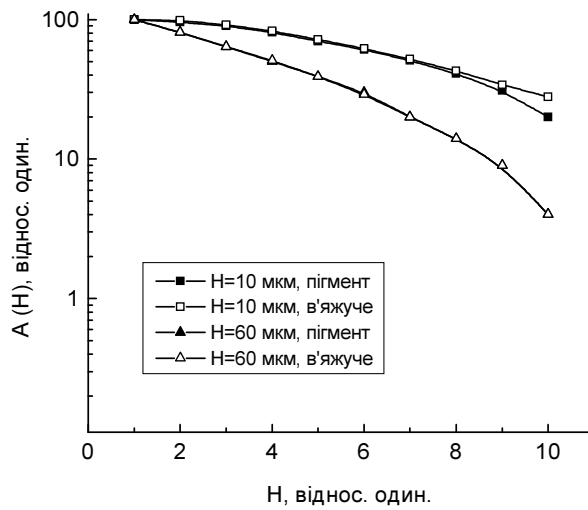


Рис.3. Глибинний розподіл поглинутого випромінювання для пігменту та в'язучого (фарбовий шар на чорній підкладці)

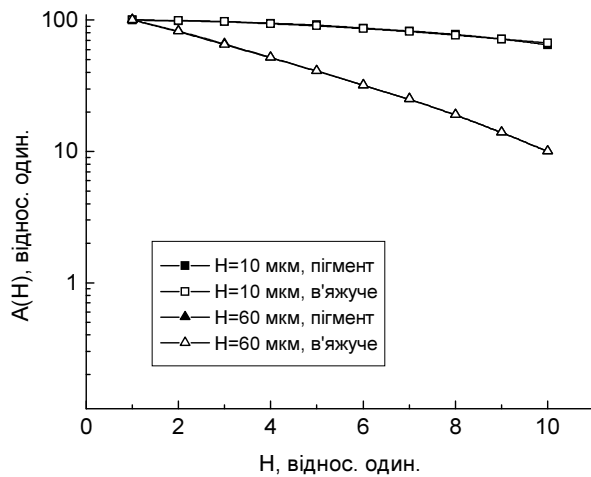


Рис. 4. Глибинний розподіл поглинутого випромінювання для пігменту та в'язучого (фарбовий шар на білій підкладці)

Наведені результати моделювання далеко не повністю представляють можливості розглянутого методу. Він може бути адаптований для дослідження більше складних, багат шарових покриттів, розгляду питань, пов'язаних зі зміною оптичних характеристик і колориметрією шарів при їхньому похилому опроміненні. Важлива перевага методу складається в можливості його застосування до реальних шарів, практично будь-яких граничних умов, можливість виділення й дослідження впливу якого-небудь одного з параметрів на значення інтегральних і диференціальних оптичних характеристик фарбових покриттів. Ще однією перевагою методу є швидкість розрахунків. Прорахунок одного варіанта структури шару на комп'ютері класу Pentium 4 становить усього кілька хвилин.

1. Иванов А.П. *Оптика светорассеивающих сред.* / А.П.Иванов. – Минск : Наука и техника, 1969. - 592 с.
2. Гуревич М.М. *Оптические свойства лакокрасочных покрытий.* ./ М.М.Гуревич, Э.Ф.Ицко, М.М.Середенко. - Л. : Химия, 1984. - 120 с.
3. *Лакокрасочные материалы и покрытия. Теория и практика : пер. с англ. / под ред. Р. Ламбуерна.* - СПб. : Химия, 1991. - 512 с.
4. Джад Д. *Цвет в науке и технике : пер. с англ. / Д. Джад, Г. Вышецки.* - М. : Мир, 1978. - 592 с.
5. Кудрявцев Б.Б. *Управление цветом пигментированных материалов.* / Б.Б.Кудрявцев, Е.Б.Манусов, В.В.Федотов. – М. : Химия, 1987. - 160 с.
6. Kozakov O. *Statistical simulation of paint optical characteristics* / O.Kozakov, I.Lazurka. // *SPIE Proc.* – 1999. Vol.3904. - P.437-441.
7. *Поліграфічні матеріали : підручник* / [Ю.Ц. Жидецький, О.В. Лазаренко, Н.Д. Лотошинська та ін.] ; під ред. Е.Т. Лазаренка. – Львів : Афіша, 2001. – 304 с.
8. Ермаков С.М. *Курс статистического моделирования.* / С.М.Ермаков, Г.А.Михайлов - М. : Наука, 1976. - 319 с.
9. Козаков О.Н. *Компьютерное моделирование раздельного поглощения излучения компонентами светорассеивающего слоя* / О.Н.Козаков // *Оптика и спектроскопия.* – 2002. - Т.93, №4. - С. 650-654.