

# 一种有效获取染料光吸收和 散射系数的新方法\*

曾 华 白凤翔 廖宁放 杨卫平 余鸿飞 尚鹤岭 肖建刚

(云南师范大学物理系, 昆明 650092)

**摘 要** 提出一种获取染料光吸收和散射系数的新方法。较之国际现行的库贝尔卡-芒克(K-M)法更有效地消除了在实际测量中, 由于存在着光透射和界面内、外反射等因素而造成的数据误差, 改善了各染料之间的加和性。实验结果表明, 采用此方法获取染料数据, 可提高配色精度约16%。

**关键词** 颜色光学, 电脑配色, 库贝尔卡-芒克定理, 光吸收和散射。

在电脑配色计算过程中, 要用到表征染料光学性质的两个物理量; 光吸收系数  $K$  和散射系数  $S$ , 如何有效获取这些光学数据是电脑配色的一项重要研究课题。目前国际上普遍采用库贝尔卡-芒克近似理论, 通过测量染色物表面反射光谱, 计算出染料的光吸收和散射系数。实际应用发现, 由于该理论的局限性, 给配色带来误差。

本文提出一种解决问题的方法, 实验表明按此方法获取染料光学数据, 明显地提高了配色计算的准确性。

## 1 获取染料光学数据的 K-M 方法

库贝尔卡-芒克光学近似理论<sup>[1]</sup>其表现形式可归结成以下两式:

$$K/S = (1 - R_{\infty})^2 / 2R_{\infty} \quad (1)$$

$$(K/S)_s = (K/S)_0 + \Phi_1 C_1 + \Phi_2 C_2 + \dots + \Phi_n C_n \quad (2)$$

(1)式称为 K-M 公式, 式中  $R_{\infty}$  表示为无限厚染色物的反射光谱,  $K$  和  $S$  分别表示染料的光吸收和散射系数, (2)式称为染料光学叠加原理, 设有  $n$  支染料参与配色, 则(2)式中  $(K/S)_s$  和  $(K/S)_0$  分别为配色织物和白坯的吸收和散射系数之比,  $C_1 \sim C_n$  为各染料的上染浓度,  $\Phi_i = (K_i/S_0)$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ), 为第  $i$  支染料单位浓度下的  $(K/S)$  值, 即为电脑配色计算中所需要的基础染料光学数据。以上参数, 除浓度  $C$  以外, 均是波长  $\lambda$  的函数。

根据(1)式, 首先将染料  $i$  按浓度  $C$  在某一确定的白坯上染成“单色”, 然后分别测出“单色”和“白坯”的表面反射系数, 按下式:

\* 国家自然科学基金、国家科技成果重点项目和国家火炬计划资助课题。

收稿日期: 1994年6月19日; 收到修改稿日期: 1994年10月31日

$$\phi = \frac{(K/S)_s - (K/S)_0}{C} = \frac{(1 - R_s)^2/2R_s - (1 - R_0)^2/2R_0}{C} \quad (3)$$

计算出  $\phi$ ，其中下标  $S$  表示单色， $0$  表示白坯。然而必须指出，K-M 公式成立是有条件限制的，库贝尔卡在推导此式时，做了如下假设：

- 1) 色料层为无穷厚，即入射光全部被色料层吸收和反射，无透射现象；
- 2) 样品界面的折射率无变化；
- 3) 光线在色料层被足够散射，以致完全呈扩散的状态；
- 4) 光线在介质的运行方向只考虑两个，一个朝上，一个朝下，并垂直于界面。

实际染色织物不完全满足这些要求。例如，纺织物结构稀疏，有明显的光透射，在实际测量表面反射光谱时，不可能将测色头置入织物内部，因而存在着物体界面的内外漫反射等等，问题造成了按(3)式计算的  $\phi$  与浓度  $C$  有关，不是一常数。

为解决这些问题，国外采用<sup>[2]</sup>对每一支染料制备成多个浓度的“单色”布样，分别测量其反射系数后，按(3)式计算出各浓度下的  $\phi$  值，以确定该染料的  $\phi(C)$ ，配色计算时，先取一中等浓度下的  $\phi$  值代入方程计算出初始配方，然后根据初始配方的浓度找出相邻两挡浓度的  $\phi$ ，用内插法得出对应的  $\phi$  又代入方程，反复叠代，直至得出最优解。

但是按(3)式计算出的只是染料的  $K/S$  近似值，(其近似程度取决于实际满足 K-M 条件的程度，近似度越高， $\phi$  与  $C$  的依赖性就应越小)，这些近似值不完全服从染料的光学叠加性，只有严格意义下的  $K/S$  才具有加合性质。K-M 法尽管可以确定一个  $\phi(C)$ ，但此  $\phi(C)$  不能严格满足光学叠加方程(2)，结果给配色带来误差。

## 2 解决问题的途径

本文提出一种新方法，该方法通过二条途径，再结合 K-M 法，可有效地获取染料光学数据，提高配色精度。

### 2.1 消除透射光的影响

根据 K-M 理论，对有限厚织物，反射系数  $R$  与无限厚织物反射系数  $R_\infty$  有如下关系：

$$R = R_\infty \frac{(R_g - R_\infty)/R_\infty^2 + (1/R_\infty + R_g) \exp [SD(1/R_\infty - R_\infty)]}{(R_g - R_\infty) + (1/R_\infty - R_g) \exp [SD(1/R_\infty - R_\infty)]} \quad (4)$$

其中  $R_g$  为测量有限厚织物时衬底的反射系数， $D$  为织物的厚度， $SD$  称为有效散射厚度。

首先将染色织物放在全黑背景上 ( $R_g \approx 0$ )，测出反射系  $R_b$ ，由(4)式可得：

$$R_b = \frac{-1 + \exp [SD(1/R_\infty - R_\infty)]}{-R_\infty + (1/R_\infty) \exp [SD(1/R_\infty - R_\infty)]} \quad (5)$$

由此可得：

$$\exp [SD(1/R_\infty - R_\infty)] = \frac{1 - R_b R_\infty}{1 - R_b/R_\infty} \quad (6)$$

然后将染色物放在一已知反射系数为  $R_g$  的较白衬底上，设测出的反射系数为  $R_0$ ，则由(6)式和(4)式得出：

$$R_0 = \frac{R_g + R_b + R_b R_g (1/R_\infty - R_\infty)}{1 - R_b - R_g} \quad (7)$$

将各测量值代入(7)式，最后导出染色织物无透射光时的  $R_\infty$ 。

### 2.2 界面内外漫反射影响的消除

在(1)式中,  $R_\infty$  应为染色织物内的光谱反射系数, 实际测量中, 由于光学探头和被测物之间存在着空气层, 因而在交界面上有内外反射, 实测的  $R'$  并非符合理论上的要求, 需要考虑消除界面的内外反射影响。桑得森提出校正公式<sup>[3]</sup>:

$$R' = \rho_e + \frac{(1 - \rho_e)(1 - \rho_i)R}{1 - \rho_i R} \quad (8)$$

式中  $R'$  为实测反射系数,  $R$  为理论上要求的织物内反射系数,  $\rho_e$  为界面的内反射比,  $\rho_i$  为界面的外反射比。它们是与波长无关的常数。如何测定  $\rho_e$  和  $\rho_i$ , 始终是一困难的事, 本文提出如下尝试。

由(1)式和(8)式可得出染色物在任一波长的  $K/S$  为:

$$K/S = \frac{(1 - \rho_i)^2(1 - R')^2}{2(R' - \rho_e)[(1 - \rho_i - \rho_e) + \rho_e R']} \quad (9)$$

实验表明, 按 K-M 近似理论获得的  $\Phi(C)$  与浓度呈单调下降关系, 染色浓度越高,  $\Phi$  值越小。因此可以对任一染料, 按最高浓度和最低浓度制备成两个“单色”, 例如对酸性染料真丝染色, 上限浓度可选为  $C_1 = 3\%$ , 下限浓度可选为  $C_2 = 0.05\%$ , 考虑到染色物的折射率主要取决于白坯, 则可分别按(7)式实测出这两个“单色”对应于无穷厚时的  $R_1$  和  $R_2$  以及白坯的  $R_0$ , 可得出在波长  $\lambda$  处两“单色”的  $\Delta\Phi$ :

$$\begin{aligned} \Delta\Phi = \Phi_2 - \Phi_1 &= \frac{(K/S)_2 - (K/S)_0}{C_2} - \frac{(K/S)_1 - (K/S)_0}{C_1} \\ &= f(\lambda, \rho_e, \rho_i) \end{aligned} \quad (10)$$

式中下标 2 代表浓度高的“单色”, 1 代表浓度低的“单色”, 0 代表白坯。

因为  $\Phi(C)$  具有单调性并且有  $C_1 < C_2$ , 所以必有  $\Delta\Phi > 0$ 。无疑, 应设法找出  $\rho_e$  和  $\rho_i$ , 使各波长的  $\Phi_1$  与  $\Phi_2$  之差为最小, 让  $\Phi(C)$  趋于一常数。设染料最大吸收处的波长为  $\lambda_0$ , 则首先在该波长处求:

$$f(\lambda_0, \rho_e, \rho_i) = \min, \quad (11)$$

得出在  $\lambda_0$  处使  $\Delta\Phi$  最小的  $\rho_{e0}$  和  $\rho_{i0}$ , 然后定义误差函数:

$$E(\rho_e, \Phi_1, \Phi_2) = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \int f(\lambda, \rho_e, \rho_{i0}, R') d\lambda \quad (12)$$

取  $E$  为最小值时, 解下列无约束的优化函数:

$$DE(\rho_e, \Phi_1, \Phi_2) = \min \quad (13)$$

波长  $\lambda_2 - \lambda_1$  取染料可见吸收波段。  $f$  函数中,  $\rho_e$  是可变参数, 而界面内反射  $\rho_i$  认为已求出, 用  $\rho_{i0}$  替代。计算时, 先将  $\rho_{e0}$  和  $\rho_{i0}$  作为初值, 代入(12)式求出  $DE$ , 然后令  $\rho_e = \rho_{e0} \pm 0.0001$ , 再代入方程求解  $E$ , 这样反复叠代, 直至  $E$  为最小值, 此时对应的  $\rho_e$  即为染料界面的外反射系数, 将  $\rho_e$  和  $\rho_{i0}$  代入(9)式可得出消除了内外反射影响的  $\Phi$  值。

### 3 实 验

用 SPT 国产电脑测配色系统<sup>[4]</sup>进行测量。精选出酸性染料 20 支, 按  $C = 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.5, 0.1, 0.05\%$  八个浓度染成“单色”, 分别用 K-M 法和新法提取两套染料数据。选择有代表性的标准色样 10 个, 在 SPT 配色程序中<sup>[5]</sup>, 分别用两套数据计算配方, 得出配方 86 个, 染色过程中, 选用的白坯, 染料和工艺均同。图 1 和图 2 以酸性染料大红 GR 和酸性柴林黄 6G 两支染料的实验结果, 其中实线为 K-M 法数据, 虚线为新法数据。

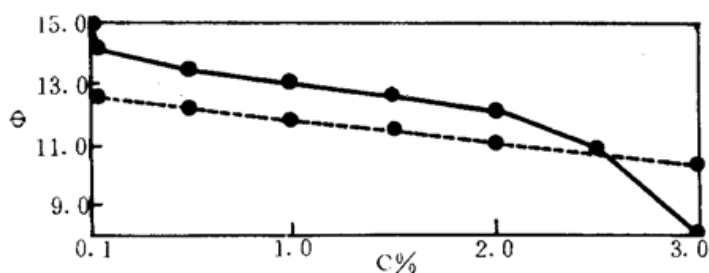


Fig. 1 Plot of  $\phi$  versus  $c$  for acid red GR Dyestuff  $\lambda = 520$  nm

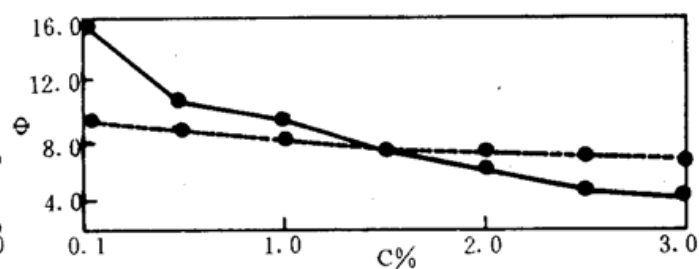


Fig. 2 Plot of  $\phi$  versus  $c$  for acid yellow 6G dyestuff  $\lambda = 420$  nm

可以看出采用新法后,  $\phi$  与  $C$  的关系明显改善。表 1 为配色结果。配色精度提高了 16%。

Table 1. Results of color matching

method	the recipes of C. C. M.	the success rate of dyeing
K-M	86	73%
the new method	86	89%

### 参 考 文 献

- [1] 徐 行等, 颜色测量在纺织工业中的应用. 北京, 纺织工业出版社, 1988: 207~231
- [2] D. Randall, Optimizing calibration dyeings for computer color matching. *Ame. Dyestuff, Rep.*, 1988, 28(9): 44
- [3] J. L. Saunderson, Calculation of the color of pigmented plasrics. *J. Opt. Soc. Am.*, 1942, 32(12): 727~736
- [4] 曾 华, SPT 光电配色理论和应用. 四川大学博士学位论文, 1993
- [5] Zeng Hua, New algorithm for optimization of computer color matching. *Opt. Eng.*, 1993, 32(8): 1815~1817

## A New Effective Method for Getting Absorption and Scattering Coefficients of Dyestuffs

Zeng Hua    Bai Fengxiang    Liao Ningfang    Yang Weiping  
Yu Hongfei    Shang Heling    Xiao Jiangang

(Department of Physics, Yunnan Normal University, Kunming 650092)

(Received 19 June 1994; revised 31 October 1994)

**Abstract** This paper presents a new effective method for getting absorption and scattering coefficients of dye. It can more effectively dispel the data error caused by transmission and reflection in practical measurement, compared with the Kubelka-Munk method. This new method improves the additive property between all dyes. The experimental results show that the accuracy of computer color matching can be improved 16% by using the dye data from this method.

**Key words** color optics, computer color matching, Kubelka-Munk theorem, absorbing and scattering.