

Моделирование распространения света в тонком красящем слое с высокой концентрацией частиц

А.Г. Волобой*, С.В. Ершов*, Э.С. Клышинский*, С.Г. Поздняков**

*Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Москва

**Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Аннотация

В работе описан подход к моделированию распространения света в тонком красящем слое. Была поставлена задача генерации изображений слоя принтерных чернил, исходя из внутренней структуры слоя и формы красящих частиц. В отличие от красок слой чернил характеризуется высокими объемными концентрациями частиц. Лучевой подход или уравнение переноса излучения практически не применимы для решения этой задачи. Поэтому был выбран путь непосредственного решения волновых уравнений, естественно, при некоторых ограничениях и упрощениях. В статье описаны постановка задачи, проблема генерации явной геометрии красящего слоя для высоких концентраций частиц, моделирование слоя чернил на бумаге. В конце статьи приведены выводы, сделанные на основе результатов моделирования.

Ключевые слова: реалистичная визуализация материалов, взаимодействие света с красящим слоем, физически корректное моделирование, ДФО/ДФП, оптические свойства поверхности.

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди работ, посвященных реалистичной компьютерной графике, выделяется целое направление, связанное с моделированием оптических свойств сложных материалов и покрытий поверхности. Разрабатываемые алгоритмы применяются для генерации реалистичных изображений материалов, состав и структура которых нам известны, однако их оптические характеристики не могут быть измерены непосредственно (например, когда таких материалов еще не существует). Если моделирование материалов базируется на законах взаимодействия света с композицией материала, и мы получаем правдоподобные результаты, то подобные алгоритмы могут быть использованы при компьютерном дизайне новых материалов.

Одни из первых разработок были проведены для акварельных красок [1]. Авторы применяют широко известную модель Кубелка-Мунка, которая является очень упрощенным решением уравнения переноса излучения (света) [2]. В настоящее время, с развитием компьютеров и математических методов стало возможным непосредственное расчет распространения света в красящих слоях с использованием уравнения переноса. Моделирование многослойных красок со сложной микроструктурой (типа перламутровых и «металлик»), предложенное в [3-4], является примером таких работ. Краска в них рассматривается состоящей из плоскопараллельных слоев прозрачного лака, содержащих также красящие пигменты, интерференционные или зеркальные частицы. Размеры частиц могут быть достаточно малы по сравнению с длиной

волны света, что требует применения алгоритмов волновой оптики (расчет фазовых функций), но сами частицы расположены достаточно далеко друг от друга, и распространение света в краске может быть рассчитано в рамках уравнения переноса излучения [2]. Результатом моделирования является двунаправленная функция отражения (ДФО) поверхности, покрытой данной краской. Полученные ДФО могут быть использованы при генерации реалистичных изображений автомобилей или других объектов.

Ткани являются сложным для визуализации и моделирования типом материала. В работе [5] расчет ДФО ткани основан на моделировании распространения света внутри нее. Освещенность ткани рассчитывается с учетом рассеяния света поверхностями и объемами нитей, ее образующих. Также принимается во внимание структура переплетения нитей, которая позволяет определить тени и свет, отбрасываемые одними нитями на другие. При расчете теней и объемного рассеяния света учитываются оптические характеристики материала, из которого состоит нить. Поверхностное рассеяние света нитью аппроксимируется по формуле Фонга. Так как все объекты моделирования имеют достаточно большие размеры применение волновой оптики при расчете оптических свойств ткани практически не требуется.

Также интересные работы были сделаны для развития средств визуализации драгоценных камней и кристаллов [6-8].

В представленной работе авторам требовалось разработать алгоритмы моделирования слоя принтерных чернил, используемых при печати фотографий. В этой задаче красящий слой состоит из малых частиц пигмента с размерами $\sim 100\div 500$ нанометров при объемной концентрации пигмента PVC (Pigment Volume Concentration), доходящей до 50%. Малые размеры частиц, высокая концентрация и малая толщина слоя (~ 1 микрона) не позволяют применять уравнение переноса излучения, как в случае с многослойными красками. Поэтому был выбран путь непосредственного решения волновых уравнений, естественно, при некоторых ограничениях и упрощениях.

2. УПРОЩЕНИЯ ВОЛНОВОЙ ЗАДАЧИ

Основное упрощение касается самого использованного волнового уравнения. Точные уравнения, описывающие распространение света, хорошо известны - это уравнения Максвелла [9]. При характерных размерах неоднородностей среды, многократно превышающих атомные размеры, возможно применение так называемых макроскопических уравнений Максвелла, когда свойства сред описываются соответствующими диэлектрической и магнитной проницаемостями. Как правило, в оптике, в частности в нашем случае, магнитная проницаемость равна 1, а

диэлектрическая проницаемость может быть комплексной величиной. Существует небольшое число точных аналитических решений макроскопических уравнений. Все они получены для простых пространственных геометрий с высокой симметрией. Тем не менее, даже в случае очень высокой симметрии, например, рассеяние плоской линейно поляризованной волны на диэлектрической сфере (теория Ми), конечный ответ представляется в виде бесконечного ряда, содержащего специальные функции математической физики. В нашем случае со сложной пространственной геометрией аналитическое решение невозможно и может быть получено только с помощью применения численной процедуры. И хотя, на наш взгляд, применение уравнений Максвелла все же предпочтительнее, нами в качестве волнового уравнения было выбрано так называемое скалярное приближение, уравнение Гельмгольца [9].

Скалярное приближение широко применяется в оптике при расчетах распространения неполяризованного излучения. Оно не учитывает поляризацию электромагнитного излучения, и приближенно можно считать, что оно соответствует электромагнитному излучению, поляризованному в плоскости раздела разных сред. В случае простых геометрий различие между результатами точных электромагнитных и скалярных расчетов может быть заметным. Однако в случае стохастических сред, когда сильное, в значительной степени изотропное, рассеяние приводит к деполяризации излучения, применение скалярного приближения вполне оправдано. Как правило, в таких случаях все существенные волновые эффекты скалярного приближения описывает достаточно хорошо.

Следует отметить одно важное преимущество скалярных расчетов перед точными электродинамическими. В отличие от уравнений Максвелла решение скалярного уравнения непрерывно вместе с его первыми частными производными. Эта непрерывность существенно снижает требование к размерам используемой пространственной сетки и времени вычислений. Кроме этого, геометрия рассеивающего объекта задается в численной процедуре просто через значения диэлектрической проницаемости в узлах сетки. Скалярное приближение оперирует всего с одним комплексным полем вместо 5-6 полей в электромагнитном случае, что позволяет проводить вычисления на отдельных компьютерах с вполне доступным размером оперативной памяти (8Гб и менее), совсем не используя параллельные вычисления.

Важное упрощение задачи касается ее геометрии. В реальности освещение всегда происходит некогерентным светом (случай лазерного освещения здесь не рассматривается), поэтому и некогерентность освещения и стохастичность геометрии в результате дают усредненную картину угловых распределений. При освещении слоя когерентным светом усреднение может быть достигнуто только за счет стохастичности структуры красящего слоя. Для этого расчет должен использовать очень большой участок поверхности слоя, что не оправдано с точки зрения объема оперативной памяти и времени расчета.

Вместо использования больших фрагментов был использован другой подход. Рассеяние вычислялось для бесконечного плоского красящего слоя, составленного из одного элементарного фрагмента размерами $\sim 10 \times 10$ микрон, а затем периодически повторенного в двух измерениях. Использование периодических структур – это прием,

достаточно часто применяемый в оптических расчетах [2]. В таком случае угловые распределения рассеянного света в дальней зоне содержат конечное дискретное число направлений. Интенсивность луча (мощность, переносимая в данном направлении) является случайной величиной и в достаточной степени зависит от геометрии элементарного фрагмента. Чтобы получить гладкие угловые распределения, необходимо произвести расчеты для различных (случайных, но подчиняющихся одной и той же статистике) реализаций элементарного фрагмента, а затем усреднить результаты по ансамблю таких реализаций. Нетрудно видеть, что подобная процедура эквивалентна усреднению по ансамблю, применяемому в статистической физике, и достаточно точно отражает реальную картину рассеяния на красящем слое.

В компьютерной графике свойства поверхностей описываются с помощью соответствующих угловых распределений интенсивности или яркости отраженного света – двунаправленной функцией отражения (ДФО). В данном случае расчеты проводятся для монохроматического освещения. Поскольку излучение с разными длинами волн взаимно некогерентно, то построение спектральных ДФО никаких трудностей не вызывает. При расчетах для периодического слоя угловые распределения имеют дискретную угловую структуру. Полное количество направлений и их плотность определяются размерами элементарного фрагмента. Используемые размеры позволяют получить гладкие угловые распределения для всех существенных направлений. Более того, поскольку согласно постановке нашей задачи красящий слой располагался на подложке (бумаге) с Ламбертовским отражением, задача получения ДФО для системы слой + бумага имеет даже более простое решение.

Уже упоминалось, что красящий слой, как правило, имеет стохастическую структуру, в которой объемная концентрация зерен пигмента (распределенных случайно по объему слоя) может составлять 50% и более. Экспериментальное измерение реальной геометрии слоя практически невыполнимо. Поэтому возникает необходимость генерации такой геометрии с помощью численной процедуры. Для одинаковых шарообразных частиц и объемной концентрации $< 30\%$ генерация достаточно проста и может быть осуществлена случайным разбрасыванием центров частиц по объему элементарного фрагмента, исключая выход за поверхности фрагмента и пересечения между частицами.

В данной работе использовались частицы более сложной формы, приближенной к реальным формам красящих пигментов в чернилах цветных принтеров. Аксиально-симметричная форма таких частиц может быть приближена с помощью нескольких жестко связанных шаров различного радиуса с возможными пересечениями. Зерна пигмента не должны выходить за поверхности элементарного фрагмента и пересекаться между собой. Кроме этого, предполагалось, что протяженные частицы в красящем слое, могут быть полностью или частично ориентированы. Для генерации геометрии с подобными свойствами была применена численная процедура, аналогичная процедуре “молекулярной динамики”. Необходимая ориентация частиц достигалась за счет наложения “магнитного” поля той или иной напряженности.

Таким образом, вся задача моделирования свелась к решению трех самостоятельных задач:

1. Генерация геометрии фрагмента красящего слоя, состоящего из частиц заданных форм и размеров и вычисление распределения коэффициента преломления на используемой пространственной сетке.
2. Решение задачи дифракции на тонком периодическом красящем слое с явным распределением коэффициента преломления конечно-разностными методами.
3. Вычисление ДФО красящего слоя, расположенного на Ламбертовской подложке исходя из результатов решения задачи дифракции.

3. ГЕНЕРАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ КРАСЯЩЕГО СЛОЯ

Дифракционный расчет рассеяния света красящим слоем предполагает задание геометрии такого слоя в явном виде. Мы проанализировали структуры реальных красящих слоев, состоящих из прозрачного связующего вещества, наполненного зернами пигмента различной формы. Зерна пигментов в объеме слоя, как правило, располагаются однородно и хаотически. Однако возможны случаи, когда зерна имеют преимущественную ориентацию или образуют конгломераты (агломинация).

Поверхность красящего слоя может быть плоской, так как при высыхании чернил действуют силы поверхностного натяжения связующего вещества. При значительных концентрациях пигмента сил поверхностного натяжения недостаточно для формирования плоской поверхности и часть частиц “выступает” из слоя, образуя поверхность с микрорельефом. Наличие микрорельефа приводит к возникновению дополнительного рассеяния.

Генерация геометрии для небольших концентраций пигментных зерен достаточно проста. Она может быть осуществлена последовательным случайным разбрасыванием центров и ориентаций частиц по объему фрагмента слоя. При этом если новая добавляемая к ансамблю частица пересекается с уже существующими частицами или выходит за границы фрагмента, то такая частица отбрасывается, и происходит случайное разыгрывание следующей частицы. Процедура заканчивается, когда фрагмент слоя наполняется необходимым числом частиц.

В случае очень тонких красящих слоев (толщина ~1 микрона) объемная концентрация зерен пигмента может достигать значительной величины $PVC \sim 30\%$ и более. При таких концентрациях случайное разбрасывание не дает необходимого результата и следует применять более сложную процедуру.

Использованный подход можно описать следующим образом. Сначала в расчетной области случайно разбрасывается необходимое число частиц, которые могут пересекаться между собой. Затем между частицами вводится упругое взаимодействие, в нашем случае – отталкивание, которое приводит к возникновению сил между пересекающимися частицами или при пересечении частицей границы области. Под действием сил частицы могут перемещаться (и вращаться), и таким образом пересечения между частицами и частиц с границами устраняются. Когда все нежелательные пересечения устранены процедура заканчивается.

Перемещение частиц под воздействием сил можно находить, например, методами спуска, минимизируя энергию взаимодействия всего ансамбля. В данной работе мы

использовали динамику первого порядка. Это означает, что частицы не обладают инерцией, и движение частицы мгновенно прекращается как только исчезает действующая на нее сила. В таком случае нет необходимости вводить массы частиц. Нетрудно видеть, что настоящий подход практически эквивалентен минимизации энергии ансамбля взаимодействующих частиц методом наискорейшего спуска.

После того как геометрия красящего слоя получена, вычисление распределения коэффициента преломления на пространственной сетке (исходные данные для задачи дифракции) не вызывает затруднений. Отметим, что в нашем случае, красящий слой может состоять из зерен различных пигментов различной формы.

Форма пигментных частиц.

Анализ красящих слоев показал, что с достаточной точностью в качестве пигментных зерен можно использовать аксиально-симметричные частицы. Такие частицы могут быть аппроксимированы некоторым количеством жестко соединенных между собой шаров. Например, цилиндрическая частица может быть аппроксимирована несколькими одинаковыми шарами с центрами, расположенными на оси цилиндра. Точность аппроксимации будет зависеть от количества шаров и расстояний между их центрами. Нетрудно видеть, что используемая аппроксимация частиц шарами позволяет конструировать частицы самой разнообразной формы. Естественно, время расчета геометрии сильно зависит как от числа частиц, так и от сложности этих частиц.

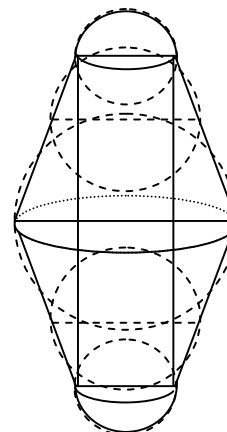


Рис. 1. Частица “рисовое зерно”.

Наш анализ показал, что во многих случаях форма частиц пигмента близка к форме рисового зерна. Поэтому, наряду с возможностью использовать частицы различной формы, мы для удобства расчетов, также использовали частицу именно такой формы (размеры частицы могут быть переменными). Схема частицы в форме рисового зерна приведена на рис. 1.

Взаимодействие между частицами.

Сила взаимодействия между пересекающимися частицами вычисляется как сумма всех сил для пересекающихся шаров, из которых частицы состоят (естественно, шары, составляющие одну частицу, не взаимодействуют между собой). Сила взаимодействия между пересекающимися шарами зависит от величины этого пересечения L (рис. 2):

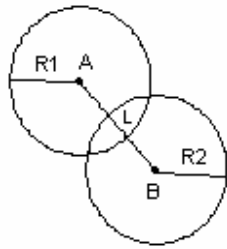


Рис. 2. Пересечение шаров. $L=R1+R2-AB$.

Конкретный вид силы взаимодействия может быть выбран в достаточно широком диапазоне. Как правило, сила взаимодействия максимальна при совмещении центров шаров и становится равной нулю для $L < 0$. В том случае, когда данный шар пересекается с несколькими шарами, действующая на него сила определяется как векторная сумма всех сил.

Если частица состоит более чем из одного шара, кроме перемещения необходимо определить возможные вращения оси симметрии частицы. При этом для каждой протяженной частицы определяется ее “центр масс” (например, геометрический центр частицы), и вычисляется действующий на частицу вращающий момент:

$$M = \sum_i [r_i \times F_i],$$

где r_i – вектор, соединяющий центр частицы и центр ее i -го шара, F_i – сила, действующая на центр i -го шара.

Движение частиц.

Точные уравнения, описывающие движение i -ой частицы имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \mu_i v_i &= F_i \\ J_i \omega_i &= M_i \end{aligned}$$

где v_i – скорость центра частицы, ω_i – вектор угловой скорости вращения оси симметрии частицы.

Величины μ и J могут быть названы коэффициентами трансляционной и вращательной вязкости. В данной задаче нет необходимости интегрировать уравнения движения с высокой точностью, поскольку конечным результатом является ансамбль непересекающихся частиц, а не точные траектории движения. Поэтому возможно применение простейшего метода интегрирования дифференциальных уравнений – метода Эйлера [10].

В процессе интегрирования уравнений движения очень важную роль играет выбор шага интегрирования. Малый шаг интегрирования обеспечивает достаточную точность вычислений, но увеличивает длительность расчетов. Слишком большой шаг интегрирования приводит к заметным ошибкам, в результате ухудшается сходимость решения, возможен переход в режим осциллирующего поведения, и даже потеря сходимости.

Обычный способ состоит в том, чтобы выбрать величину шага интегрирования, для которой изменения правых частей динамических уравнений будут невелики. В нашем случае, когда силы взаимодействия зависят от расстояний между

отталкивающимися шарами, такое условие сводится к малости перемещений шаров по сравнению с их радиусами за один шаг интегрирования. В настоящей работе выбор оптимального шага был произведен экспериментально, учитывая результаты достаточно большого числа пробных расчетов. Эти расчеты показали, что следует использовать шаг интегрирования, при котором максимальные смещения не превосходят ~ 0.2 от характерного радиуса шаров, составляющих частицы пигмента.

Описание алгоритма генерации геометрии слоя.

Вычисление геометрии слоя состоит из нескольких последовательных итераций (число итераций определяется заранее). Каждая итерация стартует с ансамбля, состоящего из некоторого числа непересекающихся частиц, находящихся в неподвижном состоянии (в самом начале расчета частиц нет совсем). Итерации состоят из следующих шагов:

1. Добавление к ансамблю новых частиц. Новые частицы распределены случайно (координаты центров и ориентация оси симметрии). Количество добавляемых частиц определено заранее и зависит от объемных концентраций частиц различных видов, используемых в вычислениях. Все вновь добавленные частицы записываются в текущий список движущихся частиц. Список движущихся частиц должен содержать частицы, которые могут пересекаться с другими частицами или с границами расчетной области. Поскольку перед началом каждой итерации все пересечения устранены, то в текущий список добавляются только новые частицы.
2. Вокселизация. Чтобы ускорить вычисления производится “вокселизация” расчетной области, т. е. вся расчетная область разбивается на одинаковые элементарные подобласти (воксели). Размеры вокселей выбираются большими, чем максимальный размер частицы. Вокселизация частиц состоит в определении соответствующего вокселя для каждой частицы. При рациональном выборе размеров вокселей возможно взаимодействие только между частицами, расположенными в соседних вокселях. Использование вокселизации позволяет существенно ускорить перебор возможных пар взаимодействующих частиц при вычислении сил и вращающих моментов.
3. Вычисление сил и вращающих моментов. Для каждой частицы из текущего списка движущихся частиц вычисляются силы и моменты, возникающие при возможном пересечении со всеми остальными частицами. Естественно, что для перебора всех взаимодействующих пар достаточно перебрать только частицы из текущего списка, т. к. частицы вне этого списка на предыдущем шаге ни с чем не взаимодействовали (покоились). Потенциально взаимодействующие частицы определяются, используя вокселизацию из п. 2. Силы и моменты, действующие на каждую взаимодействующую частицу, суммируются, а сама частица добавляется в новый список движущихся частиц. Перебор взаимодействующих пар выполнен так, чтобы избежать двойного учета взаимодействий.
4. Взаимодействие с границами области. Если частица пытается выйти за границу расчетной области, на нее начинает действовать упругая возвращающая сила, аналогичная силе между пересекающимися частицами. Возвращающая сила направлена по нормали к границе, ее

величина растет по мере удаления частицы от допустимого объема области. Вычисленные силы добавляются к силам, вычисленным в п. 3. Все частицы, вышедшие за границы, добавляются в новый список движущихся частиц.

5. Перемещения и вращения. С помощью вычисленных сил и вращающих моментов определяется шаг интегрирования. Затем происходит перемещение и вращение частиц.

6. Модификация текущего списка движущихся частиц. Вычисленный новый список движущихся частиц переписывается в текущий список. После этого новый список очищается.

7. Если пересечения не устранены и число шагов интегрирования не превышает заранее заданный лимит, то происходит переход к п. 2. В противном случае переход к п. 1.

Итерации прекращаются, когда достигается необходимая объемная концентрация пигментов.

Естественно, настоящий алгоритм имеет ограничения по объемной концентрации. Однако, для реальных концентраций пигмента, например для шарообразных частиц при объемной концентрации пигмента $< 60\%$, результаты работы генератора геометрий вполне удовлетворительные.

Мы провели достаточно большое количество расчетов и вычислили необходимые статистические характеристики распределений частиц, полученных с помощью генератора геометрий. Все расчеты дали вполне удовлетворительные результаты, а статистические характеристики распределений находились в допустимых пределах.

4. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ДФО КРАСЯЩЕГО СЛОЯ

Рассматривается стационарный режим, когда красящий слой освещается падающей скалярной монохроматической волной. В этом случае рассматривается волновое уравнение Гельмгольца:

$$\Delta u + k^2(x)u = 0 \quad (1.1)$$

где $k(x) = \eta(x)k_0$ – есть локальное волновое число, k_0 – волновое число в вакууме и η – локальный показатель преломления. В нашем случае показатель преломления различен в вакууме, частицах пигмента и в объемлющей среде.

Формально необходимо проинтегрировать уравнение Гельмгольца (1.1) во всей области, включая красящий слой и вакуум по обе стороны от него. Естественно, прямой подход, который использует дискретизированное поле во всей расчетной области, невозможен. Вместо этого мы разделим все пространство на три части: вакуум выше красящего слоя, сам слой и вакуум ниже слоя. В полупространствах заполненных вакуумом выше и ниже слоя показатель преломления постоянен, а уравнение (1.1) имеет хорошо известные аналитические решения. Таким образом, нет необходимости оперировать с полем выше и ниже слоя на пространственной разностной сетке. Для поля внутри красящего слоя аналитическое решение не существует, поэтому решение находится с помощью численной процедуры.

Решение дифракционной задачи должно быть найдено в трех разных областях. На границах этих областей, т.е. на границах вакуум-красящий слой, должны быть заданы условия сшивки для искомого решения. Для уравнения (1.1) условия сопряжения имеют простой вид: поле u вместе с его нормальной производной должно быть непрерывно на всех границ:

$$\begin{aligned} u|_{z=0-0} &= u|_{z=0+0} \\ \frac{\partial u}{\partial z}|_{x=0-0} &= \frac{\partial u}{\partial z}|_{x=0+0} \\ u|_{z=H-0} &= u|_{z=H+0} \\ \frac{\partial u}{\partial z}|_{x=H-0} &= \frac{\partial u}{\partial z}|_{x=H+0} \end{aligned}$$

Условий сшивки недостаточно. Недостающие условия, называемые условиями излучения, как правило, задаются на бесконечном удалении от рассеивающего объекта. Эти условия утверждают:

- Решение ограничено на бесконечности.
- Все компоненты поля, соответствующие приходящим волнам (за исключением падающей волны в верхнем полупространстве) исчезают на бесконечности.

В нашем случае плоской периодической геометрии условия излучения задаются в явном виде непосредственно на границах красящий слой – вакуум.

Естественно, численная процедура не может использовать бесконечную расчетную область.

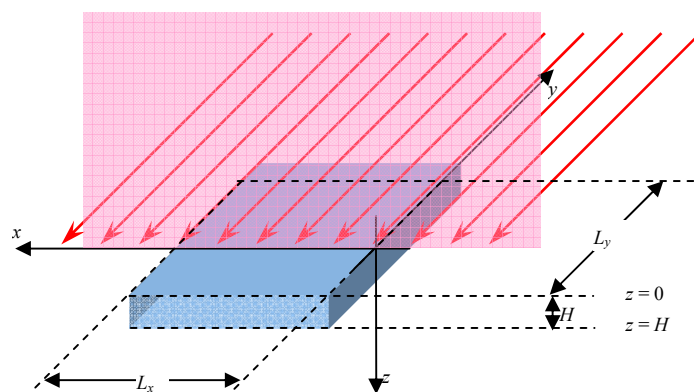


Рис. 3. Красящий слой представлен в виде пластины, параллельной плоскости Oxy . Падающая волна показана стрелками; направление падения лежит в плоскости Oxz .

Поэтому практический подход состоит в использовании бесконечного красящего слоя, состоящего из элементарного фрагмента (имеющего форму параллелепипеда), повторяющегося периодически в двух измерениях (рис. 3). Такой подход широко используется в дифракционных задачах [2]. В случае нормального падения (вдоль оси Oz) полное поле будет периодическим в двух измерениях: для всех элементарных фрагментов освещающие поля, поля внутри фрагментов и поля, рассеянные фрагментами, будут одинаковы. Отсюда следуют условия периодичности:

$$\begin{aligned} u(x + L_x, y, z) &= u(x, y, z) \\ u(x, y + L_y, z) &= u(x, y, z) \end{aligned} \quad (1.2)$$

В случае наклонного падения освещающее поле на поверхности красящего слоя имеет вид:

$$u_0 = e^{ik_0 x \sin \sigma}$$

где k_0 – волновое число в вакууме, σ – угол падения (угол между направлением освещения и нормалью к красящему слою). Поле для двух соседних периодов отличается множителем $e^{ik_0 L_x \sin \sigma}$. Если для некоторого натурального N выполняется следующее соотношение (здесь и далее λ – длина волны в вакууме)

$$\sigma = \arcsin\left(\frac{2\pi}{k_0 L_x} N\right) = \arcsin\left(\frac{\lambda}{L_x} N\right),$$

то поле будет одним и тем же для всех периодов, и мы опять можем применять периодические граничные условия (1.2). Для фрагмента с периодом порядка 100 длин волн “сетка” подобных направлений достаточна для задания всех необходимых направлений падения с приемлемой точностью.

Для других углов падения поле уже не будет периодическим, а граничные условия принимают вид:

$$u(x + L_x, y, z) = u(x, y, z)e^{ik_0 L_x \sin \sigma}$$

$$u(x, y + L_y, z) = u(x, y, z)$$

В таком случае решение дифракционной задачи удобно искать в представлении Блоха:

$$u(x, y, z) = v(x, y, z)e^{ik_0 L_x x \sin \sigma}$$

здесь v – периодическая функция x, y . Представление Блоха широко применяется в методах, использующих преобразование Фурье [2].

Итак, дифракционная задача сводится к уравнению Гельмгольца, которое решается отдельно для трех пространственных областей: заполненное вакуумом верхнее полупространство, красящий слой и нижнее полупространство также заполненное вакуумом. Периодичность позволяет применить дискретное преобразование Фурье по координатам x, y . Если отклонение коэффициента преломления от его среднего значения (внутри красящего слоя) невелико, то для нахождения Фурье гармоник поля $u_{mn}(z)$ можно применить метод теории возмущений, известный как Борновское разложение [11]. К сожалению, Борновское разложение не всегда сходится, поэтому был разработан метод решения уравнения с помощью счета на установление. Подробно математика решения задачи дифракции как с помощью Борновского разложения, так и с помощью оригинального метода счета на установление описана в [12].

Результатом решения дифракционной задачи для периодического красящего слоя являются значения волнового поля на поверхности слоя (комплексные амплитуды Фурье гармоник). Для вычисления двунаправленной функции отражения/преломления (ДФО/ДФП или BDF), описывающей диффузное рассеяние, эти амплитуды нужно преобразовать в угловое распределение рассеянного излучения в дальней зоне. Такое преобразование может быть выполнено для настоящей плоско-периодической структуры с использованием хорошо известной формулы

Кирхгофа [13]. Поскольку поле в дальней зоне представляет собой конечный набор плоских волн, можно непосредственно применить выражение для лучевой яркости [13].

Опуская вычисления, приведем только окончательное выражение для отражения.

$$G(\mathbf{v}) = k_0 \cos \theta \sum_{\text{Im} k_z = 0} |u_{mn}(0)|^2 \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{m,n}) \quad (1.3)$$

где $G(\mathbf{v})$ есть искомая плотность углового распределения интенсивности отраженного излучения, отнесенная к единичной площадке бесконечного красящего слоя. Дельта-функции возникают из-за периодичности (аналогично случаю бесконечной дифракционной решетки). Сумма $G(\mathbf{v})$ содержит только убегающие волны, зеркальной компоненте соответствует $m=n=0$. Здесь $u_{mn}(0)$ – комплексная амплитуда Фурье гармоники поля на освещенной поверхности слоя, $\mathbf{v} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ и $\mathbf{v}_{m,n} = (\sin \theta_{m,n} \cos \varphi_{m,n}, \sin \theta_{m,n} \sin \varphi_{m,n}, \cos \theta_{m,n})$ есть единичные вектора в направлении наблюдения (θ, φ) и направлении распространения соответствующей плоской волны $\theta_{mn} = \arccos(k_z/k_0)$, $\varphi_{mn} = \arctan(k_y/k_x)$,

$k_x = \frac{2\pi m + q}{L}$, $k_y = \frac{2\pi n}{L}$, $k_z = \sqrt{k_0^2 - k_x^2 - k_y^2}$, $q = k_0 \sin \sigma$. Угловое распределение для прошедшего излучения аналогично (1.3) с заменой $u_{mn}(0)$ на $u_{mn}(H)$.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧЕРНИЛ

В настоящей работе рассматривался тонкий красящий слой (чернила), нанесенный на специальную бумагу (рис. 4). Анализ рассеивающих свойств бумаги показал, что с достаточной точностью бумагу можно моделировать как плоскую поверхность, обладающую Ламбертовским отражением с интегральным коэффициентом отражения, близким к 1.

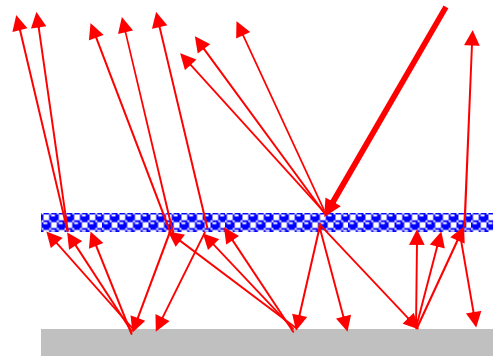


Рис. 4. Красящий слой, расположенный на диффузной подложке (бумаге) и переотражения света между слоем и подложкой. Для наглядности расстояние между слоем и подложкой преувеличено. Первичное освещение показано жирной стрелкой.

В нашем подходе и красящий слой и подложка рассматриваются как поверхности, однозначно характеризующиеся их BDF (ДФО + ДФП). Такое

рассмотрение является точным для статистически однородного слоя конечной толщины, и предполагает, что отражение от подложки полностью некогерентно.

Отметим, что падающий на бумагу свет состоит из двух компонент:

1. первичное освещение, прошедшее через красящий слой
2. свет, отраженный подложкой, а затем отраженный красящим слоем назад в сторону подложки.

При моделировании были использованы следующие входные данные:

- Оптические свойства подложки (бумага): идеальная белая Ламбертовская поверхность с интегральным коэффициентом диффузного отражения 0.9.
- Коэффициент преломления прозрачного связующего вещества слоя $n=1.558$.
- В расчетах были использованы три реальных пигмента Red, Yellow, Blue, а также искусственный пигмент Green. Действительная часть коэффициента преломления всех пигментов $Re(\eta) = 1.4$. Мнимая часть коэффициента преломления пигментов $Im(\eta)$ представлена на рис. 5.

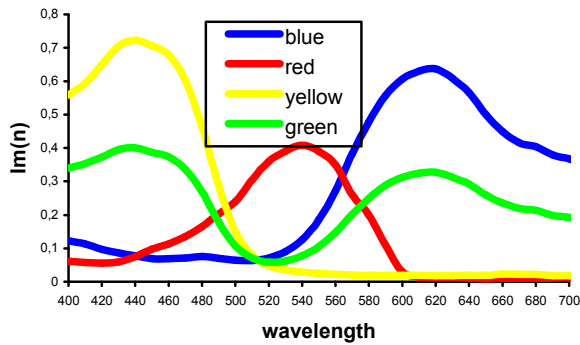


Рис. 5. Спектрограммы мнимых частей коэффициентов преломления использованных пигментов.

В расчетах были использованы различные объемные концентрации пигментов, а также смеси Yellow и Blue при полной концентрации PVC 15%, 30% и 50%.

Были использованы шарообразные и цилиндрические зерна пигментов. Диаметр шарообразных зерен изменялся от бесконечно малой величины (молекулярная смесь) до 450 nm. Длина цилиндрических частиц была равна 6 радиусам цилиндров. Размер цилиндрических частиц определялся с помощью “эффективного диаметра”, т.е. диаметра равновеликого шара. Были использованы цилиндры со следующими значениями эффективного диаметра: 100 nm, 200 nm и 300 nm. Для цилиндрических частиц были использованы три типа ориентации: хаотическая, в плоскости слоя и перпендикулярно плоскости слоя.

В работе было исследовано влияние многочисленных параметров на визуальное отображение красящего слоя. К ним относятся:

- Объемная концентрация частиц пигмента
- Размер частиц
- Форма частиц
- Ориентация частиц

- Агломинация
- Шероховатость освещенной поверхности красящего слоя.

Параметры изменялись в достаточно широких пределах – были промоделированы около 260 вариантов различных комбинаций параметров.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ

Были получены цветные изображения для всех вариантов моделирования. Каждое изображение в таблицах состоит из двух частей как показано на рис. 6. Левая вертикальная полоса изображает красящий слой на бумаге при естественном освещении. Вертикальная координата задает угол наблюдения, меняющийся от 0° (верх) до 60° (низ). Квадратное изображение справа представляет диффузную ДФО при освещении параллельным светом под заданным углом. Вертикальная координата есть такой же угол наблюдения, горизонтальная координата задает угол освещения, изменяющийся от 0° до 60° слева направо. Для лучшего сравнения яркость всех изображений была выбрана так, чтобы чисто Ламбертовская поверхность с интегральным коэффициентом диффузного отражения равным 1 давала цвет (255,255,255) в цветовом пространстве RGB.

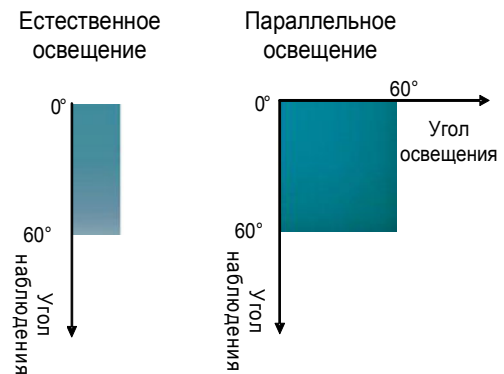


Рис. 6. Визуальное представление результатов моделирования.

Были изучены полученные изображения для всех 260 вариантов моделирования и сделаны следующие выводы:

О влиянии размеров частиц. Цвет красящего слоя становится более насыщенным при росте концентрации пигмента (что вполне естественно) и при уменьшении размеров частиц (а вот такое поведение цвета трудно предположить без моделирования). Кроме этого, влияние размеров сильнее при малых концентрациях пигмента и ослабевает с ростом концентрации. Для шарообразных и цилиндрических частиц роль размера практически одна и та же.

Для объяснения такой роли размеров частиц были проанализированы спектрограммы пропускания красящего слоя для случая шарообразных частиц. Для концентрации 15% пропускание красящего слоя из частиц диаметром 300 nm значительно отличается от пропускания молекулярной смеси (бесконечно малых частиц). Причина такого эффекта заключается в сильных флуктуациях коэффициента преломления в объеме красящего слоя, особенно важны флуктуации мнимой части коэффициента преломления, определяющей поглощение в слое. Для высокой

концентрации 50% пропускание практически совпадает для разных размеров частиц.

При невысоких концентрациях пигмента и достаточно крупных частицах в объеме слоя возникают участки, поглощение в которых ослаблено за счет флуктуаций. За счет этих участков слой пропускает заметно больше света в тех частях видимого спектра, которые хорошо поглощаются при более однородной структуре слоя. Естественно, что размеры областей с уменьшенным поглощением уменьшаются с ростом концентрации или при уменьшении размеров пигментных зерен (за счет их более однородного пространственного распределения).

Также было замечено, что насыщенность цвета при агглютинации соответствует насыщенности цвета для частиц большего размера, что вполне естественно, поскольку образование кластеров увеличивает эффективный размер пигментных зерен.

Программный продукт, построенный на описанных алгоритмах, используется производителем комплексов печати фотографий и цветных принтеров. С помощью программного моделирования возможно отследить тенденции изменения итогового цвета в зависимости от использования частиц различной формы и при различных концентрациях, влияния выравнивания частиц в процессе высыхания и т.д. Это существенно снижает затраты при разработке нового вида чернил.

Работа поддержана грантом РФФИ № 08-01-00649, грантом Президента РФ «Ведущие научные школы» НШ-8129.2010.9, а также фирмой Integra Inc. (Япония).

7. ЛИТЕРАТУРА

- [1] C.J. Curtis, S.E. Anderson, J.E. Seims, K.W. Fleischer and D.H. Salesin. Computer-generated watercolor. In Proceedings of the 24th Annual International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques. ACM Press/Addison-Wesley Publishing Co., 1997, pp. 421-430. DOI=<http://doi.acm.org/10.1145/258734.258896>.
- [2] И. Исимару, Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. М.: Мир, 1981.
- [3] S. Ershov, K. Kolchin, K. Myszkowski, Rendering pearlescent appearance based on paint-composition modeling. Computer Graphics Forum, Vol. 20, No 3, 2001, pp. 227-238.
- [4] S. Ershov, A. Khodulev, K. Kolchin, Simulation of sparkles in metallic paint. Proceeding of GraphiCon'1999, Moscow, 1999, pp. 121-128.
- [5] N. Lobalzo, A. Voloboy, Physically based lighting model for cloth and its validation. Proceeding of GraphiCon'2008, Moscow, 2008, pp. 61-68.
- [6] В.А. Дебелов, М.А. Саттаров, Проблемы реалистической визуализации кристаллов. Труды Графикон-2003, Москва, 2003, стр. 221-227.
- [7] A. Weidlich, A. Wilkie, Modeling aventurescent gems with procedural textures. Proceeding of SCCG'2008, Budmerice, Slovakia, 2008, pp. 61-68.
- [8] P. Sikachev, I. Tisevich, A. Ignatenko, Using quad-trees for acceleration of physically-based image-space rendering of glare. Proceeding of GraphiCon'2008, Moscow, 2008, pp. 69-73.
- [9] Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов, Уравнения в частных производных математической физики. М.: Высшая школа, 1970.
- [10] Л.Э. Эльсгольц, Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. М.: Наука, 1969.
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Том III. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
- [12] А.Г. Волобой, С.В. Ершов, С.Г. Поздняков Решение дифракционной задачи для моделирования освещения тонкого красящего слоя. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН № 75, 2009. <http://www.keldysh.ru/e-biblio/>
- [13] С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский, Введение в статистическую радиофизику. Часть II. М.: Наука, 1978.

Abstract

One approach to the problem of lighting simulation inside of ink or paint layer is described. The problem arose in the task of realistic rendering of ink basing on information about shape of ink pigments and layer structure. High pigment volume concentration characterizes ink layer structure. Ray tracing or LTE are hardly applicable here. Therefore it was decided to solve it as a diffraction problem basing on wave optics methods. The article describes task formulation, algorithm of generation of explicit ink layer geometry with high PVC, simulation of visual appearance of ink on a paper. Results and conclusions are presented in the end of article.

Keywords: *realistic rendering, lighting simulation of paint or ink layer, physically based lighting, BRDF/BTDF, surface optical properties.*

Authors:

Alexey G. Voloboy, PhD, senior researcher, Keldysh Institute for Applied Mathematics RAS (KIAM RAS). E-mail: voloboy@gin.keldysh.ru

Sergey V. Ershov, PhD, senior researcher, KIAM RAS.

Edward S. Klyshinsky, PhD, researcher, KIAM RAS.

Sergey G. Pozdnyakov, researcher, NRNU "MEPHI".