

**Beschreibung
der Farbe und
Farbwirkung in der
Automobilbranche**



Beschreibung der Farbe und Farbwirkung in der Automobilbranche mit einer eingeschränkt abgetasteten BRDF (bidirektionalen Reflektanzverteilungsfunktion) und einem neuartigen, tragbaren Mehrwinkel-Spektralfotometer

Farbige Kunststoffe sind komplexe chemische Verbindungen. Entsprechend anspruchsvoll sind die zugehörigen Verfahren, die ständig weiterentwickelt werden. Heute arbeiten Ingenieure mit Nanomaterialien und Mikrotechnologie, um zu möglichst geringen Kosten eine möglichst große Wirkung zu erzielen, ohne die Farbidée des Designers zu verfälschen.

Herkömmliche Spektralfotometer mit einer gerichteten oder Kugelgeometrie können moderne Effektpigmente nicht präzise erfassen. Im Folgenden stellen wir einen neuen Ansatz vor: eine räumlich eingeschränkt abgetastete BRDF (bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion), die mit Differenzwinkeln arbeitet, in Kombination mit einem phänomenologischen Modell, das die Auswirkungen der Rezeptur (bis in den Mikro- und Nanobereich) und der Verfahren auf die Farbwirkung beschreibt. Wir erläutern zunächst geeignete spektralphotometrische Messgeometrien. Anhand praktischer Beispiele werden dann rezeptur- und verfahrensbedingte Abweichungen sowie Methoden der Ursachenanalyse erläutert.

Hintergrund

Materialien mit dekorativen Effekten, etwa Glanz- oder Struktureffekten, werden heute noch weitgehend anhand konkreter Farbproben visuell ausgewählt, beschrieben und geprüft. Herkömmliche Farbmessverfahren bieten keine wesentliche Hilfe für die Qualitätssicherung und Fehlerdiagnose dieser Materialien. Zahlreiche Anwendungsgebiete, wie etwa strukturierte und designte Perlglanzpigmente für Kunststoffe, könnten von digitalen Verfahren zur Definition, Weitergabe und Darstellung der Farbwirkung profitieren.

Die Wirkung einer Farbe setzt sich aus der Farbvalenz und dem daraus entstehenden Farbeindruck zusammen. Das lokal reflektierte Farbspektrum muss in Beziehung zu den Beobachtungsbedingungen gesetzt werden. Dabei sind die Lichtverhältnisse und der Beobachtungswinkel ebenso zu berücksichtigen wie die Materialeigenschaften, etwa die Form und Oberflächenbeschaffenheit. Unser anfängliches Ziel war es, auf der Grundlage der Spektralmessung ein präzises Verfahren zur Erfassung und Beschreibung der Farbwirkung zu entwickeln. Dazu galt es zunächst, aus den abstrakten Konzepten der Farbwahrnehmung ein konkretes, aussagekräftiges Modell abzuleiten. Unsere derzeitige Arbeit besteht darin, aus vorhandenen Modellen eine globale Definition der Farbwirkung unter Berücksichtigung der Wahrnehmungsumstände, also des Farbeindrucks, abzuleiten.

Messtechnisch betrachtet arbeiten wir mit einem Spektroradiometer. Eine Lichtquelle wird unter einer bestimmten optischen

Übertragungsfunktion (OÜF) auf ein Messobjekt gerichtet. Das auftreffende Licht tritt nach den Maxwellschen Gleichungen in Wechselwirkung mit den verschiedenen Schichten und Grenzflächen des Objekts, wobei es zu Mie- und Rayleigh-Streuung kommt. Dieses Phänomen wird aus der jeweiligen Beobachtungsrichtung durch Abtastung nach der BRDF (bidirektionalen Reflektanzverteilungsfunktion) bzw. BSSRDF (bidirektionalen Oberflächenstreuungs-Reflektanzverteilungsfunktion) erfasst. Die OÜF des dazu verwendeten optischen Systems wird ausgewertet und zur Einbeziehung der Beobachtungsbedingungen wie nachfolgend beschrieben umgerechnet. Aus den so ermittelten Daten lassen sich wertvolle Informationen ableiten, die als Grundlage der Farbentwicklung, Farbkommunikation und Entscheidungsfindung dienen können.

Die Schwierigkeit bei der Errechnung der BRDF ist der Zeitaufwand, der mit den erforderlichen goniophotometrischen Messungen aus zahlreichen Beleuchtungs- und Beobachtungswinkeln einhergeht. Die tragbaren Messgeräte, auf die wir unsere Untersuchungen stützten, lassen sich nur mit Mühe länger als eine bis eineinhalb Sekunden in der gleichen Position halten. Diese Zeitspanne ist zu kurz für die große Anzahl von Winkelkombinationen, die für eine rigorose, deterministische Messung nötig sind. Wäre also eine eingeschränkt abgetastete Messung denkbar? Auf welche Winkel und Spektraldaten kommt es an?

Das hier vorgestellte System zur Messung der Farbwirkung ist ein kompaktes Mehrwinkel-Spektralfotometer (siehe Abbildung 1), das durch eine räumlich eingeschränkte Erfassung gerichteter Reflexionsspektren eine herkömmliche BRDF-Berechnung vornimmt. Das mit speziellen Interferenzfiltern arbeitende Spektralfotometer ist anderen Ansätzen im Hinblick auf den Dynamikbereich und die Messpräzision überlegen. Seine Messdaten sind mit den Ergebnissen herkömmlicher Messgeometrien korrelierbar. Durch die Beleuchtung und Beobachtung aus zahlreichen Differenzwinkeln werden umfangreiche Messdaten gesammelt, aus denen sich eine globale Beschreibung der Farbwirkung ableiten lässt. Ausgehend von dieser Plattform wurde eine Gerätereihe entwickelt, die Anwender vom Design bis zur Fertigung unterstützt.

Das Abtastverfahren für die BRDF-Werte hat einen entscheidenden Einfluss auf die messtechnische Beschreibung der Farbwirkung. Bei mehrwinkligen spektroskopischen Messungen fallen enorme Datenmengen an. Unter Anwendung rigoroser physikalischer Modelle müssen die für den Farbeindruck relevanten Merkmale herausgefiltert werden. Die Forschungsdisziplinen Optik, Elektromagnetismus, Computergrafik

und visuelle Wahrnehmung haben die Modellierung von Oberflächeneigenschaften entscheidend vorgebracht. Durch Anpassung dieser Verfahren für den industriellen Einsatz wurde eine Reihe von Reflexionsmodellen entwickelt, die das BRDF-Verhalten und die Beschaffenheit von Oberflächen parametrisieren. Die gesammelten Daten lassen sich im XML-Format aufbereiten, um eine digitale Verständigung über die gewünschte Farbwirkung von der Farbgebung bis zur Fertigung zu ermöglichen (siehe Abbildung 2).

Die BRDF-Daten lassen sich anhand der folgenden Gleichung aus den Messwerten des Mehrwinkel-Spektrofotometers ableiten:

$$L_r(\mathbf{x}, \omega) = \int_{\Omega_x} f_r(\mathbf{x}, \omega', \omega) L_i(\mathbf{x}, \omega') (n_x \bullet \omega') d\omega'$$

Dabei gilt: L_r ist die reflektierte Strahlung unter \mathbf{x} in der Richtung ω , Ω_x ist die Hemisphäre der Eingangsrichtungen, und f_r ist der BRDF-Wert unter \mathbf{x} , der in unserem Fall sowohl eine Glanzkomponente f_rS als auch eine diffuse Komponente f_rD enthält. Es folgt:

$$f_r(\mathbf{x}, \omega', \omega) = f_{rs}(\mathbf{x}, \omega', \omega) + f_{rd}(\mathbf{x}, \omega', \omega)$$

L_i ist die Eingangsstrahlung, für deren Verhältnis zum Fluss gilt:

$$L_i(\mathbf{x}, \omega') = \frac{d^2\Phi_i(\mathbf{x}, \omega')}{(n_x \bullet \omega') d\omega' dA_i}$$

Ein mehrschichtiges Photonentransportmodell erfordert eine deutlich andere volumetrische Berechnung als in der vorangehenden Gleichung. Sowohl die optische Tiefe der einzelnen Streuschichten als auch eine Phasenfunktion zur Beschreibung des Streuverhaltens müssen einbezogen werden. Es gilt:

$$L_r(\mathbf{x}, \omega) = \int_0^s e^{-\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}')} \sigma_a(\mathbf{x}') L_e(\mathbf{x}', \omega) d\mathbf{x}' + \int_0^s e^{-\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}')} \sigma_s(\mathbf{x}') \int_{\Omega_{4\pi}} p(\mathbf{x}, \omega', \omega) L_i(\mathbf{x}, \omega') d\omega' d\mathbf{x}' + e^{-\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}+s\omega)} L(\mathbf{x}-s\omega, \omega)$$

Für die optische Tiefe $\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ gilt:

$$\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int_x^{x'} \sigma_t(t) dt$$

Die Phasenfunktion hängt vom Aufbau der Beschichtung sowie dem für das Streuverhalten ausschlaggebenden Medium ab. Meist arbeitet man mit der Henyey-Greenstein-Phasenfunktion, die sich an die verschiedenen Schichten und Streumedium anpassen lässt. Ihre Grundform lautet:

$$p(\Theta) = \sum_{i=1}^N \frac{w_i(1-g_i^2)}{4\pi(1+g_i^2-2g_i\cos\Theta)^{1.5}}$$

wobei $w_i=1$

Dabei bestimmt g_i die verschiedenen Streuquerschnitte und w_i das Gewicht. Je nach der Komplexität der Beschichtung, den Messbedingungen und den abzuleitenden Werten sind für eine umfassende BSSRDF-Analyse eines Anstrichs mit 3 bis 4 Schichten, wie etwa einer Automobillackierung, zwischen 72 und 90 Messwinkel (Kanäle) erforderlich. Dagegen können für eine

BRDF-Messung eines homogenen Kunststoffes, wo es in erster Linie um Rezeptur- und Verfahrensänderungen (statt um eine reine Rezepturanalyse) geht, schon 10 bis 12 Winkel ausreichen.

Ziel der Forschungsarbeiten

Nach geltenden Industrienormen nutzt man zur Farbmessung von Kunststoffen goniometrische Spektralphotometrie mit einer gerichteten oder Kugelgeometrie. Das Problem bei diesem Ansatz ist, dass Kunststofffarben mit Effektpigmenten eine dreidimensionale Struktur aufweisen. Je nach der Perspektive des Beobachters entsteht ein unterschiedlicher Farbeindruck. Herkömmliche gerichtete Messgeometrien und Systeme mit nur einem optischen Empfänger tragen dieser Abhängigkeit von den Beleuchtungs- und Beobachtungsbedingungen keine Rechnung. Ändert sich die molekulare Ausrichtung der Effektpigmente, so ändert sich auch die Farbwirkung. Wenn man also lediglich, wie heute üblich, die Streu- und Reflexionswerte einer Farbprobe mittelt, wird die Richtungsabhängigkeit der BRDF (BSSRDF), und damit der Farbwirkung entsprechend der Oberflächenbeschaffenheit und dem molekularen Aufbau, nicht ausreichend berücksichtigt. Marktübliche Systeme können rezeptur- und verfahrensbedingte Abweichungen der Farbwirkung derzeit nicht zuverlässig erfassen. Wir möchten eine wirtschaftliche Kombination aus Hard- und Software bereitstellen, die dazu in der Lage ist.

Herangehensweise

Zwei physikalische Phänomene, die das Verhalten einfallender Lichtwellen bestimmen, können genutzt werden, um die Beschaffenheit eines Mediums (oder einer Beschichtung) messtechnisch zu erfassen. Das erste Phänomen ist die Tatsache, dass alle Medien dispersiv sind. Dies bedeutet, dass ihre Fähigkeit, auftreffendes Licht zu brechen, (die so genannte Brechzahl) von der Wellenlänge des Lichts abhängt, sich also beispielsweise zwischen blauem (400 nm) und rotem Licht (700 nm) unterscheidet. Die wahrgenommene Farbe des Mediums (also seine Absorptionsfähigkeit) hat hierauf keinen Einfluss. Auch ein als schwarz oder glänzend wahrgenommenes Medium (wie etwa ein Spiegel) weist Dispersion auf, da das Licht nicht direkt an der Oberfläche, sondern im Medium reflektiert bzw. absorbiert wird. (Letztlich geht es hier um die Permittivität (Dielektrizitätskonstante) des dispersiven Mediums. Die komplexe Brechzahl (Brechung + Absorption) verhält sich proportional zur Quadratwurzel der Permittivitätszahl.) Das zweite Phänomen ist die Streuung des Lichts in einem Medium. Dieses Verhalten lässt sich auf unterschiedliche Weise beschreiben, hängt jedoch wiederum von der Wellenlänge des Lichts ab. Blaues Licht wird anders gestreut als rotes. Alle Medien streuen Licht in gewissem Maße, selbst durchsichtig erscheinendes Glas. Das von einem Medium (oder einer Beschichtung) gestreute Licht lässt sich mit einem hochempfindlichen Spektralphotometer messen. Die winzigen Abweichungen zwischen den Streupunkten des blauen und roten Lichts geben Aufschluss über die Beschaffenheit des Mediums. Wichtig ist in diesem Zusammenhang auch, dass Energie nicht verloren geht. Ist man mit den Eigenschaften der Lichtenergie vertraut, so kann man äußerst komplexe Untersuchungen an einem Medium vornehmen, indem man das zurückgeworfene Licht und dessen Eigenschaften misst. Wenn Licht auf



ein Medium trifft, wird es reflektiert, gebrochen, gestreut oder absorbiert, in jedem Fall aber bleibt seine ursprüngliche Energie erhalten. (In diesem Bereich spielen noch zahlreiche weitere physikalische Phänomene, wie etwa die Polarisation, eine Rolle, deren Erörterung an dieser Stelle aber zu weit führen würde. Der Sonderfall der Interferenz wird nachfolgend im Zusammenhang mit Effektpigmenten behandelt.)

Das vielleicht einfachste anwendbare Modell ist die so genannte Effective Medium Theorie, die auf dem Elektromagnetismus beruht. Sie besagt, dass ein Medium unabhängig von seiner Komplexität als homogene Einheit betrachtet werden kann. Beispielsweise lässt sich ein Medium aus 3 Schichten und 9 Inhaltsstoffen beschreiben, als handle es sich um eine einzige Substanz. Dabei arbeitet man mit einem Mittelwert der Inhaltsstoffe, die nach ihrer Verteilung durch die Schichten, nach der Stärke der Schichten und der Beschaffenheit der dazwischen liegenden Grenzflächen gewichtet werden. Das Streuverhalten eines Mediums wird durch seine Rezeptur, d. h. die Mischformel und den Schichtenaufbau, bestimmt. Ändert sich die Rezeptur, und damit etwa die Partikelverteilung bei gleichbleibender mittlerer Partikelgröße, so ändert sich auch das Streuverhalten.

Unter Anwendung der Effective Medium Theorie kann man das Streuverhalten von Licht relativ einfach beschreiben, indem man den Streuabstand im Verhältnis zum Reflexionspunkt auf dem Medium in einem Koordinatensystem darstellt. Die Streuweite in eine bestimmte Richtung (vorwärts, rückwärts oder seitlich) lässt sich als Vektor darstellen, dessen Betrag vom Anteil der Lichtenergie abhängt, die nicht absorbiert, sondern reflektiert (gestreut) wird. Indem man eine solche Rechnung für jede Wellenlänge vollzieht, lässt sich das dispersive Verhalten des Mediums bestimmen. Ein Medium, das alle Wellenlängen gleichmäßig in alle Richtungen streut, wird als ideal diffus bezeichnet. Diese Eigenschaft erreicht der Werkstoff Spectralon™ (auch als Fluorolon™ bezeichnet) in hohem Maße. Gut präpariert erscheint er unter allen Beleuchtungsgeometrien und Beobachtungswinkeln als diffus weiß, und auch bei sehr flacher Lichteinstrahlung kommt es zu keinem Glanzeffekt. Am einfachsten lässt sich das Streuverhalten in verschiedene Richtungen erfassen, indem man für jede Wellenlänge unter jedem Beobachtungswinkel einen gebundenen Vektor von der Mitte des Mediums zum Sensor des Messgeräts zeichnet. Der Betrag des Vektors entspricht der gemessenen Energie. Summiert man nun Wellenlänge für Wellenlänge die Vektoren der einzelnen Beobachtungswinkel, so erhält man einen Gesamtvektor pro Wellenlänge. Dieses Verfahren der Vektoraddition unter Anwendung der Effective Medium Theorie kann die Farbwirkung in der nötigen Differenziertheit erfassen.

Nach geltenden Industrienormen nutzt man zur Farbmessung von Kunststoffen goniometrische Spektralphotometrie mit einer gerichteten oder Kugelgeometrie. Das Problem bei diesem Ansatz ist, dass Kunststofffarben mit Effektpigmenten eine dreidimensionale Struktur aufweisen. Je nach der Perspektive

des Beobachters entsteht ein unterschiedlicher Farbeindruck. Herkömmliche gerichtete Messgeometrien und Systeme mit nur einem optischen Empfänger tragen dieser Abhängigkeit von den Beleuchtungs- und Beobachtungsbedingungen keine Rechnung. Sie messen zwar das Beugungs- und Reflexionsverhalten einer Farbprobe, versagen aber bei visuellen Effekten, wie etwa dem Glanz. Dass sich BRDF (BSSRDF), und damit die Wirkung dieser Effekte, von Winkel zu Winkel unterscheiden, können sie nicht ausreichend berücksichtigen.

Aufgrund der beschriebenen Unzulänglichkeiten der herkömmlichen Messgeometrien mit nur einem optischen Empfänger entschlossen wir uns, ein neuartiges System zu entwickeln, das mit mehreren Differenzwinkeln arbeiten sollte. Um die Weiterverwendbarkeit vorhandener Messdaten zu gewährleisten, galt es, auf bisherigen Lösungen aufzubauen, statt einen allzu radikalen Neuanfang zu suchen. Da wir außerdem eine tragbare, wirtschaftliche Lösung anstreben, schieden aufwändigere Systeme wie Goniophotometer aufgrund der zu langen Messdauer und mangelnden Stabilität aus. Anhand umfangreicher Experimente ermittelten wir die erforderliche Mindestanzahl von Differenzwinkeln, die direkte Aussagen über die rezeptur- und verfahrensbedingten Eigenschaften einer Farbprobe ermöglichen würden. In einer statistisch geplanten Versuchsreihe maßen wir mehrere Thermoplast-Spritzgießteile, die Abweichungen in der Rezeptur und Verarbeitung aufwiesen, mit einem Goniophotometer. Die Ergebnisse wurden sorgfältig ausgewertet und mathematisch dargestellt. Auf diese Weise ermittelten wir als ideale Messgeometrie für das neue Gerät 2 zusätzliche Effektwinkel (bisher waren es 5) sowie 4 zur Ebene versetzte Differenzwinkel. Indem wir außerdem eine zweite Lichtquelle hinzufügten, konnten wir die Zahl der Messwerte verdoppeln, ohne einen entsprechenden Anstieg der Kosten oder Komplexität in Kauf zu nehmen (siehe Abbildung 3).

Nach diesem Grundprinzip fertigten wir mehrere Prototypen, die wir in der oben beschriebenen Versuchsanordnung – ausgeweitet um subtilere Rezeptur- und Verfahrensänderungen – eingehend prüften.

Zur Auswertung der Rohdaten nutzten wir unser Vektoradditionsverfahren. Diese Methode basiert auf Prinzipien der Effective Medium Theorie, wonach sich Spektraldaten aus mehreren Winkeln zu einem zwei- oder dreidimensionalen Diagramm zusammenfassen lassen. Die Vektoren der einzelnen Winkel werden jeweils nach dem Reflexionsfaktor gewichtet und addiert. So entsteht eine Folge von Koordinatenpunkten im dreidimensionalen Raum, von denen jeder einer Wellenlänge des Lichts entspricht.

Die gewichtete Vektorsumme wird außerdem um die Vektorgesamtlänge einer ideal weißen Lambertschen Fläche skaliert, um hinreichende Vergleichbarkeit mit typischen Reflexionswerten zu gewährleisten. Das verwendete Koordinatensystem umfasst die Glanzrichtung (z-Achse), die zur Glanzrichtung orthogonale Projektion der Beleuchtungsrichtung (y-Achse) sowie das Kreuzprodukt beider Richtungen (x-Achse). Die so entstandene Kurve bezeichnen wir als xDNA-Profil.



Das xDNA-Profil basiert auf der Summe der Vektoren in den verschiedenen Beobachtungsrichtungen, gewichtet nach dem Reflexionswert. Ein weiterer, optionaler Korrekturfaktor ermöglicht es, Richtungen auszuschließen oder hervorzuheben oder auch die jeweils vorliegende Energie einzubeziehen. Die nachfolgend aufgeführten Daten basieren auf einer Anordnung mit einer Lichtquelle (in der herkömmlichen Position bei 45°) und 10 diffusen Messkanälen (ohne Glanz).

Wurden Anlageneinstellungen geändert, so unterscheiden sich natürlich die messbaren Auswirkungen von System zu System. Bei zwei formgleichen, aber verschieden im Raum liegenden xDNA-Kurven kann man zwar auf Verfahrensunterschiede schließen. Zur genauen Eingrenzung der Ursache aber (z. B. geänderte Einstellungen, neue Anlagen, Zusatzstoffe oder Schwankungen der Umgebungsbedingungen, wie etwa der Luftfeuchtigkeit) reichen rein optische Kriterien nicht aus. Um die Formen mehrerer xDNA-Spektren zu vergleichen, arbeiten wir mit drei linearen Transformationen: der Translation (Verschiebung), Rotation und Skalierung. Alle diese Abbildungsverfahren werden relativ zu einer Referenz vorgenommen. Der Translationsvektor, die Rotationsmatrix und der Skalierungsfaktor werden gemeinsam berechnet, wobei das abgebildete xDNA-Spektrum mit Hilfe eines Prokrustes-Algorithmus nach der Methode der kleinsten Quadrate an das xDNA-Referenzspektrum angepasst wird. Zu Vergleichszwecken werden außerdem die Zwischenergebnisse nach der Translation und Rotation verschoben, um sie mittig an der Referenz auszurichten.

Rotation

Das Ergebnis der Rotation eines verschobenen Spektrums xDNA_t wird xDNA_a genannt. Zu einer solchen Beziehung zwischen zwei Kurven kommt es in der Regel durch eine Wechselwirkung zwischen dem inneren Aufbau und den Verfahren. Beispielsweise lässt sich bei Kunststoffformteilen auf diese Weise eine verfahrensbedingte Änderung der Partikelausrichtung oder Umverteilung der Partikelgröße aufgrund des Molekulargewichts feststellen.

Rezepturänderungen lassen sich von Fall zu Fall besser mit dem xDNA_a- oder dem xDNA_s-Spektrum untersuchen. Beispielsweise kann es vorkommen, dass zwei Proben mit ausschließlich verfahrensbedingten Abweichungen deutliche xDNA_a-Unterschiede aufweisen. Erst mit dem skalierten xDNA_s-Spektrum lässt sich dann die Rezeptur als Problemursache ausschließen. Umgekehrt kann man sich Fälle vorstellen, wo die xDNA_s-Unterschiede bei deutlichen Rezepturabweichungen minimal sind, etwa bei verschiedenen diffusen Grautönen.

Analog zur DNA im biologischen Sinne lässt sich das Verhältnis zwischen einem untransformierten xDNA- und einem skalierten xDNA_s-Spektrum mit dem Unterschied zwischen dem Phänotyp und Genotyp vergleichen. Der Phänotyp eines Lebewesens ist nicht allein auf seine genetischen Anlagen, sondern auch auf Umwelteinflüsse zurückzuführen. Ebenso werden die xDNA-

Eigenschaften einer Oberfläche durch deren Aufbau (xDNA_s) und durch Umgebungsfaktoren (also die Fertigungsverfahren) beeinflusst. Bei xDNA-Transformationen sind neben den abgebildeten Spektren auch die Transformationsparameter zu berücksichtigen. Ein einzelner Wert kann hier nicht alle relevanten Informationen erfassen. Andererseits haben Kennzahlen oder Farbabstandsformeln den Vorteil, komplexe Sachverhalte einfach, aber dennoch relativ aussagekräftig auszudrücken.

Nachfolgend werden Verfahren vorgestellt, mit denen sich herkömmliche Farbabstandsformeln auf das xDNA-Koordinatensystem ausweiten lassen. Weiterhin besprechen wir Formeln, die Reflexionswerte direkt berücksichtigen, und umreißen Anwendungsmöglichkeiten dieser verschiedenen Formeln für räumlich transformierte xDNA-Daten.

Die dF-Formel

Um aus Spektraldaten Farbwerte abzuleiten, arbeitet man mit verschiedenen Gewichtungsverfahren (z. B. CIE Lab, dE*, dE_{94'}, dE₂₀₀₀ sowie Kompensationsverfahren für Beleuchtung und Beobachtung). Entsprechend können auch die Farbabstände eines dreidimensionalen xDNA-Spektrums bestimmt werden. Mögliche Verfahren zur Ausweitung herkömmlicher Formeln auf höher dimensionale Spektren sind:

1. Berechnung der Farbwerte und Farbabstände für die Einzelebenen x, y und z, etwa nach XYZ oder $L^*a^*b^*$. Bildung der Quadratwurzel aus der Quadratsumme der Farbabstände für die Einzelebenen.
2. Berechnung der XYZ-Daten für die Einzelebenen x, y und z. Verwendung dieser Werte als xyz-Komponenten vektorwertiger XYZ-Daten, um anschließend die Beträge der dreidimensionalen XYZ-Vektoren zu berechnen. Aus den eindimensionalen XYZ-Beträgen lassen sich nun $L^*a^*b^*$ - und Farbabstandsdaten ableiten.

Die Farbabstandsformel, die durch die Ausweitung der konventionellen Delta E-Messung nach Verfahren 1 entsteht, nennen wir dF. Sie kann auf einfache xDNA-Kurven oder auch auf die transformierten Kurven xDNA_t, xDNA_a oder xDNA_s angewendet werden. Die Farbabstandsmaße der transformierten Kurven lauten dF_t, dF_a und dF_s.

Da farbmetrische Funktionen an der menschlichen Wahrnehmung orientiert sind, könnte man vermuten, dass dF für die transformierten xDNA-Spektren xDNA_t, xDNA_a und xDNA_s nicht der optimale Ansatz ist. Dennoch eignen sich die beiden oben beschriebenen Verfahren gleichermaßen für transformierte und untransformierte xDNA-Daten.

Beispielmessungen

Zur Veranschaulichung haben wir eine Reihe von Beispielmessungen wachsender Komplexität vorgenommen, deren Ergebnisse am Ende dieses Dokuments zu sehen sind. Dabei arbeiteten wir mit einer einzigen Lichtquelle (mit einem Einfallswinkel von 45°) und 10 zum Glanz versetzten Beobachtungswinkeln (siehe Abbildung 3). Da xDNA vorrangig den Glanz misst, beginnen wir mit einer Probe, die in hohem Maße diffus ist.



Spectralon™

Spectralon ist ein diffus weißer Werkstoff mit einer im Wesentlichen halbkugelförmigen BRDF. Die Reflexion liegt über das gesamte sichtbare Spektrum bei 99,1 % und ist unter allen Winkeln diffus. Aufgrund der einheitlichen BRDF für alle Richtungen und Wellenlängen haben auch sämtliche Vektoren den gleichen Wert. Im xDNA-Diagramm liegen daher die Werte aller 31 Wellenlängen übereinander, wie in Abbildung 4a und 4b zu sehen. Wie auch in allen nachfolgenden Diagrammen zeigt dabei die z-Achse (Glanzrichtung) in die Höhe, die y-Achse (Beleuchtungsrichtung) in die Breite und die x-Achse (seitliche Achse zum Instrument) in die Tiefe. Abbildung 4b zeigt dieselbe Messung wie Abbildung 4a, doch mit geändertem Maßstab des Koordinatensystems. Die winzigen in Abbildung 4b ersichtlichen Abweichungen sind darauf zurückzuführen, dass das Spectralon nassgeschliffen wurde. In Abbildung 4c schließlich wurden dem Spectralon schwarze Pigmente hinzugefügt, was zu den Reflexionswerten 99,1 %, 80 %, 60 %, 40 %, 20 %, 10 %, 5 % und 2 % führte.

Keramikstandards

Abbildung 5a und 5b zeigen eine Messreihe auf Graustufen-Keramikstandards. Die Reflexionswerte liegen hier bei 1 %, 3,5 %, 15 %, 32 %, 50 % und 88 %. In Abbildung 5b ist (anders als bei der Spectralon-Probe) eine Glanzabweichung der einzelnen Wellenlängen zu sehen. Diese ist auf die dünne Glasierschicht der Kacheln zurückzuführen.

Rote und grüne BCRA-Kacheln

Die Abbildungen 6a bis 6d beziehen sich auf die rote bzw. grüne Kachel der BCRA-Reihe. Abbildung 6a zeigt die rote xDNA-Kurve, Abbildung 6b dagegen die zugehörigen Spektraldaten im unverarbeiteten Zustand. Zu beachten ist wiederum die seitliche Verzerrung durch den Glanz, die jedoch (im Unterschied zu den Graustufenkacheln) keine Schwankungen bei den einzelnen Wellenlängen aufweist. In Abbildung 6c und 6d sind entsprechende Darstellungen für die grüne Kachel zu sehen. Der Glanz macht sich hier als geringfügige x-Abweichung in Schleifenform bemerkbar.

Organische BASF-Färbemittel in Polypropylen-Proben

In den Abbildungen 7 ist eine Polypropylen-Messreihe mit unterschiedlichen Pigmentverhältnissen zu sehen. Im Einzelnen: 100 % organische Pigmente, 99,5 % organisch mit 0,5 % Schwarz, 30 % organisch mit 70 % Weiß, 15 % organisch mit 85 % Weiß, 8 % organisch mit 92 % Weiß und zuletzt 2 % organisch mit 98 % Weiß. Die organischen Färbemittel sind Violett K5011, Blau K6330, Grün K9360, Gelb K0961 HD und Rot K3911 HD.

Weitere Proben

Abbildung 8 zeigt das xDNA-Diagramm der organischen BASF-Färbemittel in reiner Konzentration über das gesamte Spektrum.

Weitere Proben

Die xDNA-Kurven in Abbildung 9 zeigen Unterschiede der Oberflächenbeschaffenheit.

Weitere Proben

Abbildung 10 bezieht sich auf Graustufen in denselben Konzentrationen, jedoch mit schwarzen und weißen Pigmenten.

Fazit

Wir haben ein neuartiges Messmodell vorgestellt: eine räumlich eingeschränkt abgetastete BRDF (bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion), die mit Differenzwinkeln arbeitet, in Kombination mit einem phänomenologischen Ansatz, der die Auswirkungen der Rezeptur (bis in den Mikro- und Nanobereich) und der Verfahren auf die Farbwirkung beschreibt. Wir erläuterten zunächst geeignete spektralphotometrische Messgeometrien. Anhand praktischer Beispiele wurden dann rezeptur- und verfahrensbedingte Abweichungen sowie Methoden der Ursachenanalyse erläutert. Ausgehend von diesen Schilderungen stellten wir unser xDNA genanntes Analyseverfahren vor, das die Dimensionalität der Messdaten unter Aufrechterhaltung ihrer Winkelabhängigkeit reduziert, um das Verhältnis zwischen perceptiven Effekten (z. B. Oberflächenbeschaffenheit und Glanz) einerseits und rezeptur- und verfahrensbedingten Eigenschaften andererseits präzise zu erfassen. Abschließend führten wir geeignete Beispiele von xDNA-Messungen an.

Ausblick

Auch weiterhin zielen unsere Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf robuste, tragbare Systeme für die Erfassung und Weitergabe wirkungsbezogener Farbdaten ab. Eine logische Fortführung unserer bisherigen Bemühungen sind räumlich verteilte Messungen sowie die zugehörigen Berechnungs-, Modellierungs- und Kommunikationsverfahren.

Literaturverzeichnis

QED: The Strange Theory of Light and Matter, Richard P. Feynman, Princeton Science Library, 1971

Zur Elektrodynamik bewegter Körper, Albert Einstein, Annalen der Physik, 17, 1905

Multiple Scattering Processes, Harriet Kagiwada, Addison-Wesley Publishing, 1975

Farbenphysik für industrielle Anwendungen, Georg A. Klein, Springer-Verlag, 2004

Light and Matter, Yehuda B. Band, Wiley, 2006

Radioactive Transfer, Subrahmanyan Chandrasekhar, Oxford University Press, 1960

A novel technique for analysis of electromagnetic scattering from microstrip antennas of arbitrary shape, S. Uckun, T.K. Sarkar, S.M. Rao, M. Salazar-Palma, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Band 45, Ausgabe 4, April 1997, S. 485-491

A vector inverse algorithm for electromagnetic scattering, B. Borden, U.S. Naval Weapons Center, China Lake, CA, SIAM Journal on Applied Mathematics (ISSN 0036-1399), Band 44, Juni 1984, S. 618-626

Electromagnetic Scattering by a System of Dielectric Spheres Coated With a Dielectric Shell, A.K. Hamid, M.I. Hussein, M. Hamid, University of South Alabama, Mobile, November 2003

Fast analysis of electromagnetic scattering from finite strip gratings on a grounded dielectric slab, A. Valero, R.G. Rojas, Radio Science, Band 35, Ausgabe 6, S. 1307–1314 (Website von Radio Science), 2000

A Numerical Solution for Electromagnetic Scattering from Large Faceted Conducting Bodies by Using Physical Optics-SVD Derived Bases, G. Tiberi, A. Monorchio, G. Manara, R. Mittra, IEICE Transactions on Electronics, Band E90-C, Nr. 2, S. 252-257, 2006

Finite Elements for Wave Electromagnetics, P.P. Silvester, G. Pelosi, IEEE Press, New York, 1994, ISBN 0-7803-1040-3, S. ix+534

Illustrationen und Schaubilder

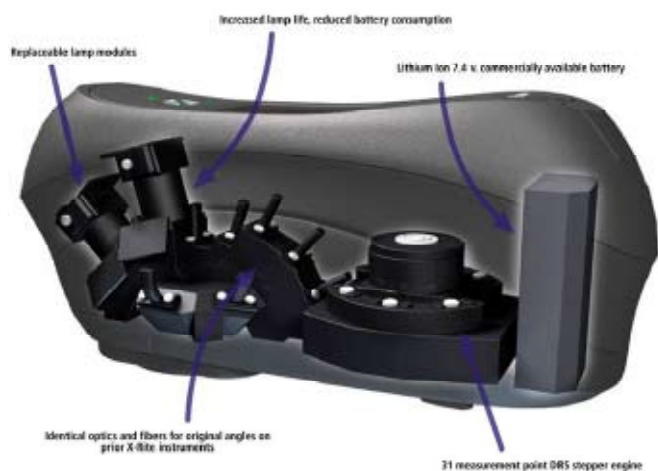


Abbildung 1: Mehrwinkel-Spektralfotometer MA98 mit Differenzwinkeln

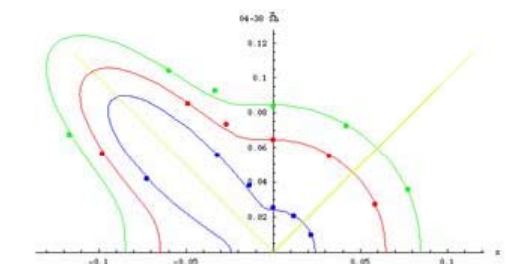
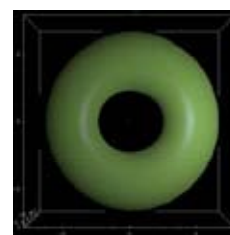


Abbildung 2: Anwendung des BRDF-Modells auf eine Mehrwinkelmessung mit Darstellung der zugehörigen Oberfläche

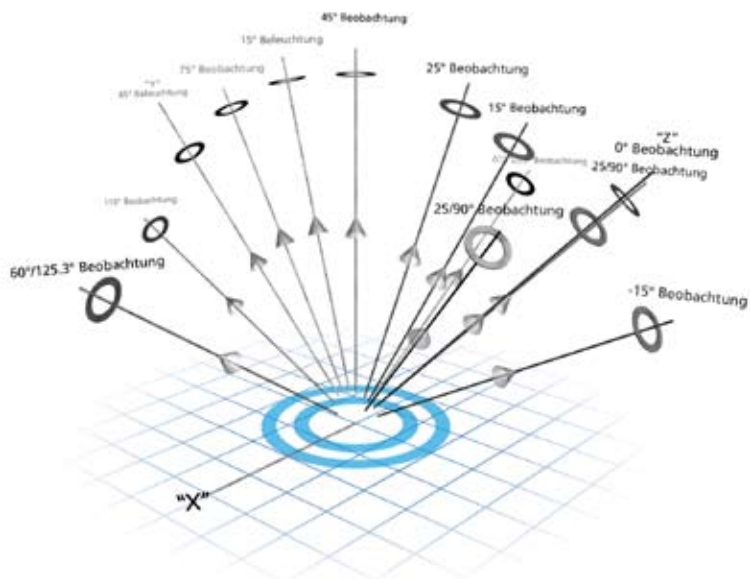


Abbildung 3: Messgeometrie des MA98

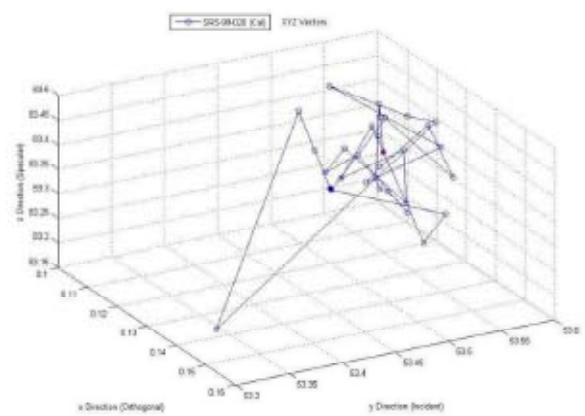
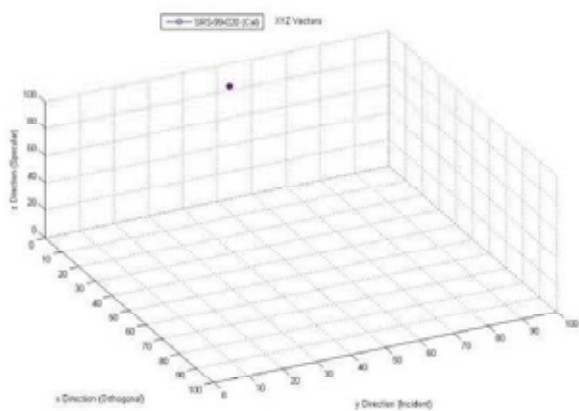
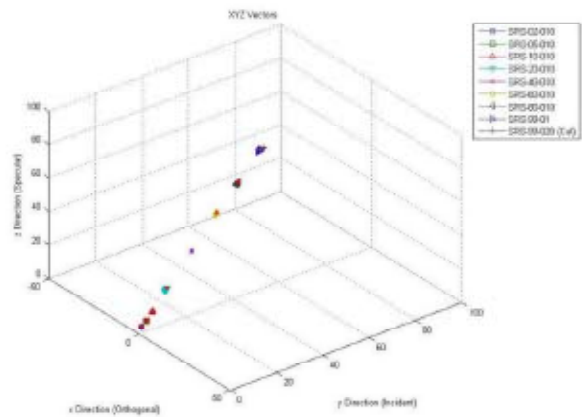


Abbildung 4a und 4b: Testmessungen mit Spectralon.
In Abbildung 4c wurden dem Spectralon schwarze Pigmente hinzugefügt, was zu den Reflexionswerten 99,1 %, 80 %, 60 %, 40 %, 20 %, 10 %, 5 % und 2 % führte.



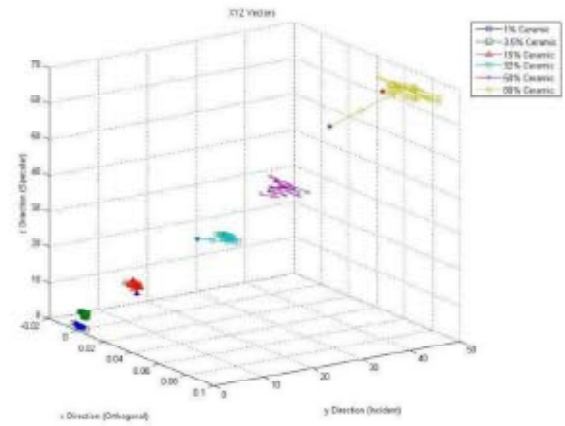
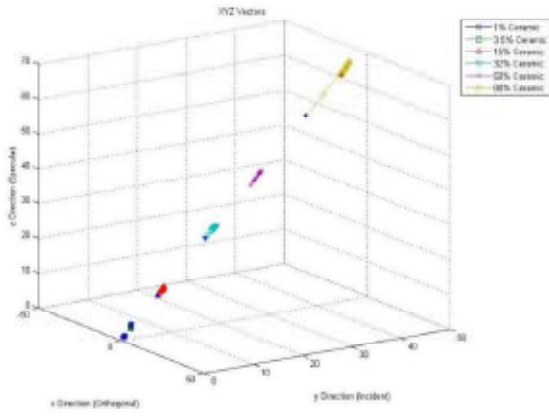
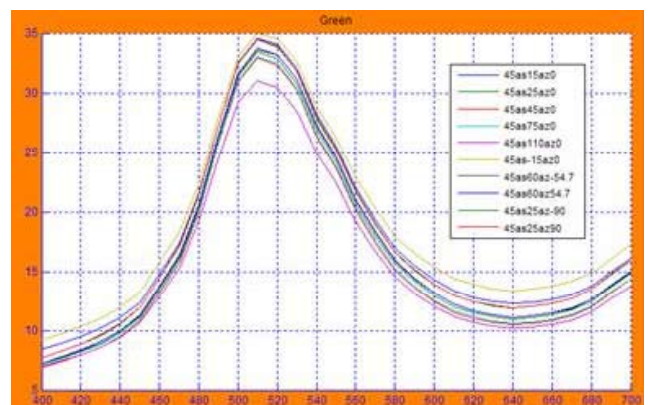
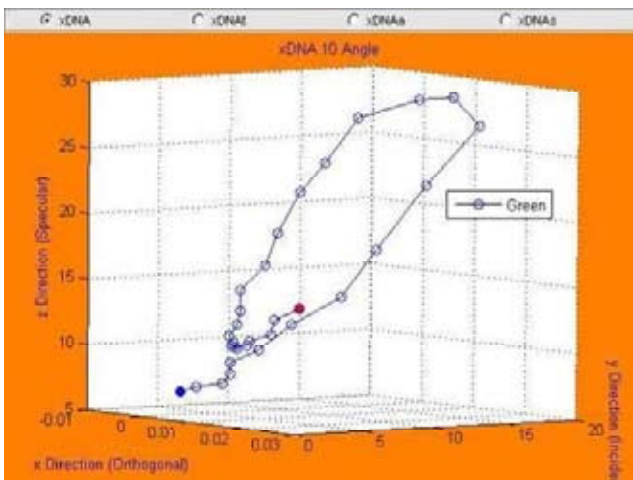
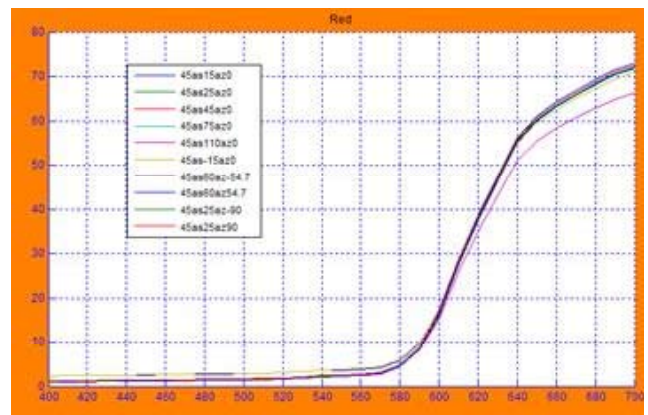
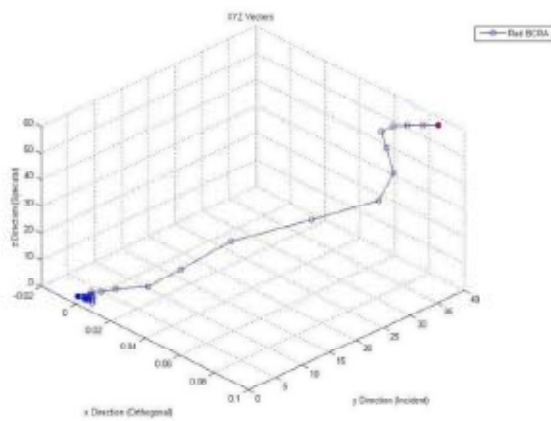
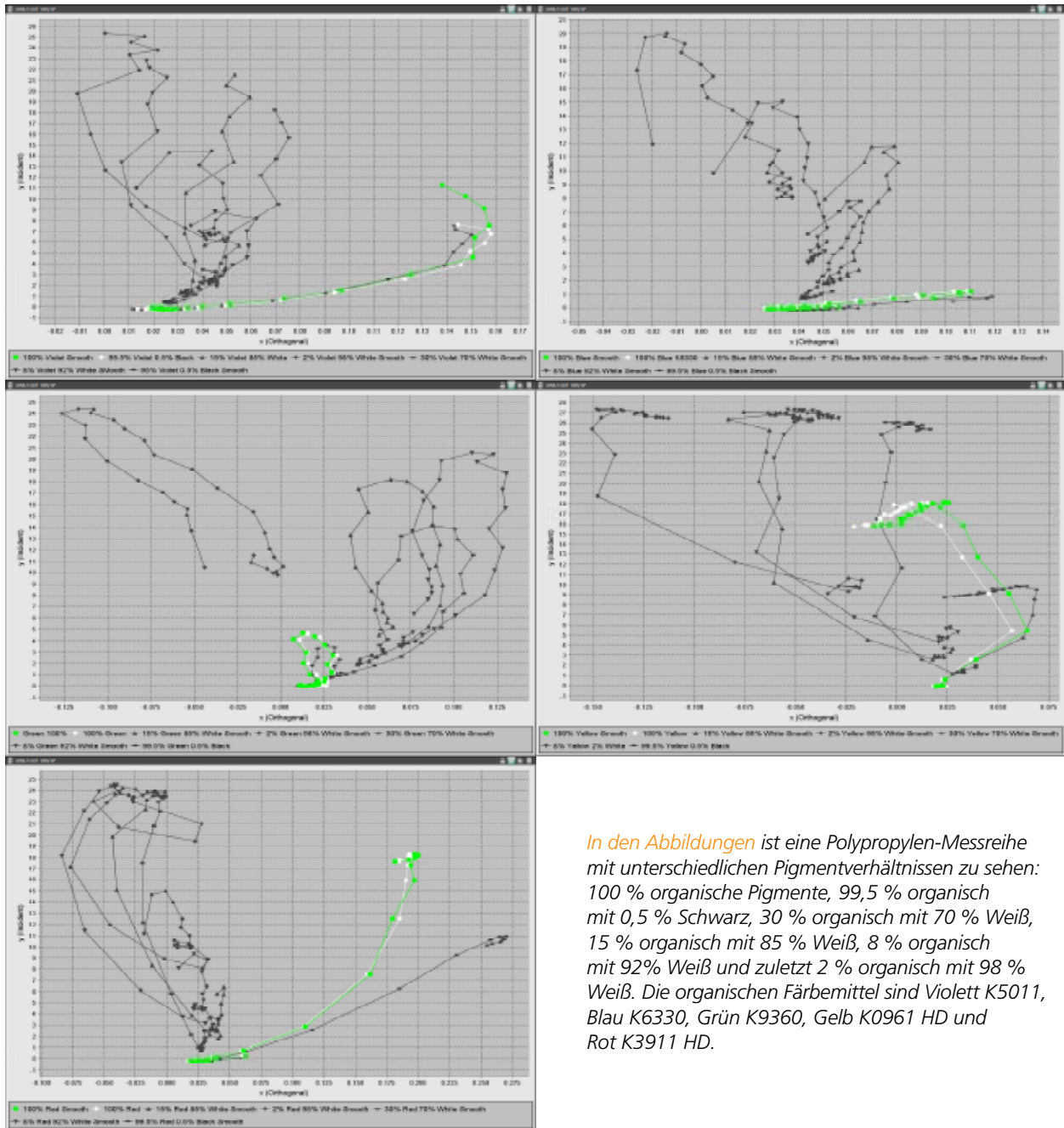


Abbildung 5a und 5b zeigen eine Messreihe mit Graustufen-Keramikstandards. Die Reflexionswerte liegen hier bei 1 %, 3,5 % 15 %, 32 %, 50 % und 88 %.



Die Abbildungen 6a bis 6d beziehen sich auf die rote bzw. grüne Kachel der BCRA-Reihe. Abbildung 6a zeigt die rote xDNA-Kurve, Abbildung 6b dagegen die zugehörigen Spektraldaten im unverarbeiteten Zustand. In Abbildung 6c und 6d sind entsprechende Darstellungen für die grüne Kachel zu sehen.



In den Abbildungen ist eine Polypropylen-Messreihe mit unterschiedlichen Pigmentverhältnissen zu sehen: 100 % organische Pigmente, 99,5 % organisch mit 0,5 % Schwarz, 30 % organisch mit 70 % Weiß, 15 % organisch mit 85 % Weiß, 8 % organisch mit 92% Weiß und zuletzt 2 % organisch mit 98 % Weiß. Die organischen Färbemittel sind Violett K5011, Blau K6330, Grün K9360, Gelb K0961 HD und Rot K3911 HD.

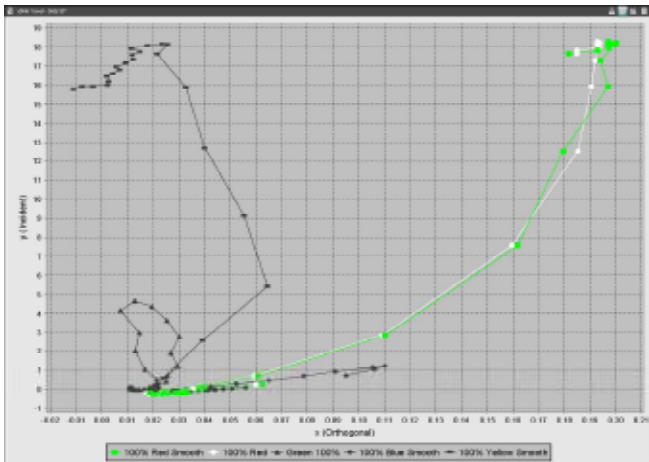
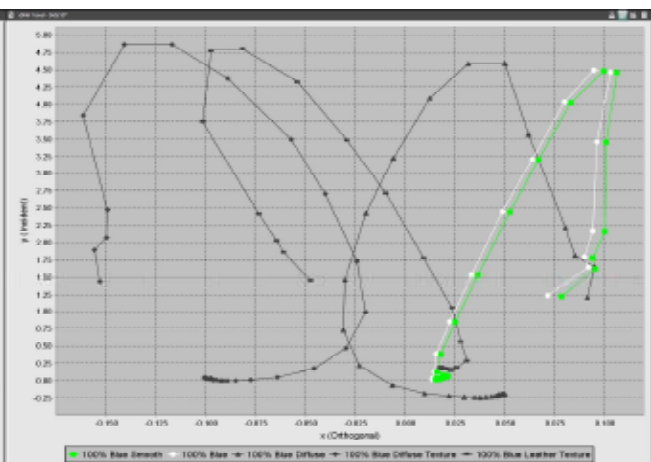
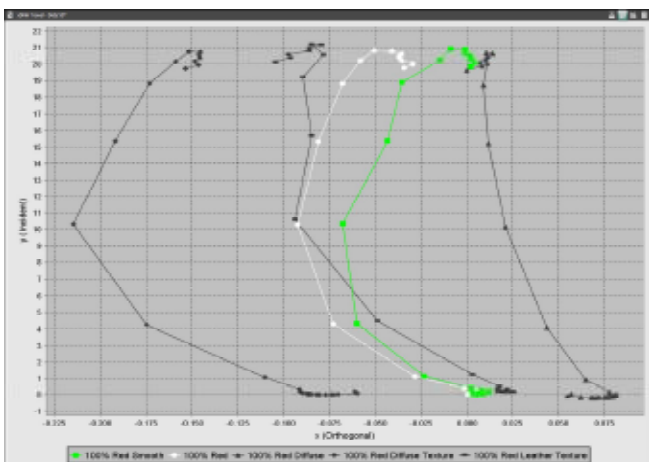


Abbildung 8 zeigt das xDNA-Diagramm der organischen BASF-Färbemittel in reiner Konzentration über das gesamte Spektrum.



Die xDNA-Kurven in Abbildung 9 zeigen Unterschiede der Oberflächenbeschaffenheit.

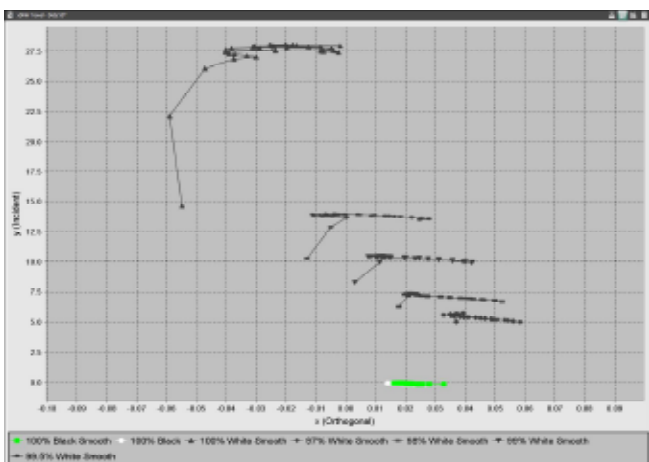


Abbildung 10 bezieht sich auf Graustufen in denselben Konzentrationen, jedoch mit schwarzen und weißen Pigmenten.

