

# 基于光子计数能谱 CT 的含能材料等效原子序数测量方法

杨亚飞<sup>1,2</sup>, 张才鑫<sup>1\*</sup>, 陈 华<sup>1</sup>, 张伟斌<sup>1</sup>, 田 勇<sup>1</sup>, 张定华<sup>2,3</sup>, 黄魁东<sup>2,3\*</sup>

1. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621999
2. 西北工业大学航空发动机高性能制造工业和信息化部重点实验室, 陕西 西安 710072
3. 西北工业大学航空发动机先进制造技术教育部工程研究中心, 陕西 西安 710072

**摘 要** 双能 CT 或能谱 CT 可以测量材料的等效原子序数, 对含能材料的成分检测和生产工艺改进具有重要意义, 但现有方法存在复杂度高、设备要求高等缺点。为提高等效原子序数的测量精度, 并降低设备要求和算法复杂度, 提出了一种基于新型 CeTe 光子计数探测器的等效原子序数测量方法。该方法利用材料的衰减特性, 重新推导了两个能量区间线性衰减系数之比与等效原子序数的关系。该方法不依赖于双能 CT 或能谱 CT 的专业知识, 只需利用光子计数探测器对三种已知材料进行能谱 CT 扫描与重建, 即可得到等效原子序数的标定曲线, 并对未知材料进行等效原子序数测量。在实际应用中, 只需保证标定实验和测量实验在相同条件下进行, 即可将重建误差、探测器响应误差、射束硬化效应和散射效应等影响因素纳入到标定曲线(相当于重新对 NIST 数据进行了特定扫描条件下的标定), 并抑制上述因素对最终结果的影响。相较于其他方法, 该方法鲁棒性和通用性较强, 且大幅降低了设备要求和算法复杂度。同时, 该方法允许相对较宽的能量区间, 可以较充分的利用 X 射线源所发出的光子, 使检测效率满足了工业检测和医学成像的需要, 具有良好的商业应用前景。实验结果表明, 在当前标定范围(等效原子序数 6~13)和扫描条件下, 该方法测量的等效原子序数相对误差小于 2%, 具有较高的可靠性。在实际含能材料生产检测中, 该方法在不破坏含能材料的情况下对高衰减杂质成分进行了有效判断, 指出了高衰减杂质是实际生产过程中混入的高原子序数杂质, 而不是高密度的含能材料。这表明该方法能够有效解决含能材料生产中的成分检测难题, 并有望促进含能材料生产工艺的改进, 具有重要的工程意义。

**关键词** 光子计数能谱 CT; 含能材料; 等效原子序数; 杂质识别

**中图分类号:** O434.14 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)05-1400-07

## 引 言

计算机断层成像(computer tomography, CT)利用 X 射线光谱对物体进行透射成像, 作为一种快速、简单、非破坏性的现代分析手段, 在医学诊断和治疗以及工业无损检测中有着广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。CT 图像表征了每个像素内材料的线性衰减系数分布情况, 该系数由 X 射线能量和材料特性(其质量密度和等效原子序数)共同决定<sup>[4]</sup>。等效原子序数是一个假设的单一元素的原子序数, 其相同质量密度下的衰减特性与被测量的化合物或混合物完全相同。相较于材料衰减系数, 等效原子序数可以更好的体现材料内部组成。例如, 水

和炸药(硝酸铵和燃料油)的衰减系数相近, 但等效原子序数差异较大。而实际 CT 检测中, 由于 X 射线源产生的光谱很宽(这与传统 CT 理论中 X 射线源只能发出特定能量光子的假设相违背), 积分型探测器对整个光谱的光子进行能量积分, 导致质量密度和等效原子序数均不相同的材料在给定的光谱下可能表现为近似的衰减系数, 这导致传统 CT 无法完成材质的有效识别<sup>[5]</sup>。以含能材料为例, 在实际生产检测中可经常发现含能材料样品中含有高衰减的杂质, 其衰减值远远高于传统含能材料, 甚至高于金属铝。从 CT 理论分析, 高衰减杂质可能是含能材料高聚集(等效原子序数与传统含能材料接近, 组成类似, 但密度远高于传统含能材料)或者高原子序数杂质(等效原子序数远高于传统含能材料, 组成

收稿日期: 2021-02-03, 修订日期: 2021-11-08

基金项目: 国家科技重大专项(J2019-Ⅶ-0013-0153), 国家自然科学基金项目(51675437), 基础加强计划技术领域基金项目(2019-JCJQ-JJ-391), 陕西省重点研发计划项目(2020GY-145)资助

作者简介: 杨亚飞, 1990 年生, 中国工程物理研究院化工材料研究所联合培养博士研究生, 西北工业大学机电学院博士研究生

e-mail: yangyaf@mail.nwpu.edu.cn \* 通讯作者 e-mail: zcx2325574@163.com; kdhuang@nwpu.edu.cn

与传统含能材料差异很大)造成的。但传统 CT 无法获得材料的等效原子序数,因此很难判断该类杂质的成因并针对杂质改进生产工艺。

作为传统 CT 的补充,双能 CT 最早由 Alvarez 和 Macowski 等提出。该技术利用两种不同光谱的投影值获取材料的等效原子序数。双能 CT 发展迅速,但实际中存在光谱测量困难,标定过程复杂,噪声放大等缺点。据此,Rutherford 等通过使用两个不同的 X 射线管电压(例如 100 和 140 kVp),提出了一种以氧为标准元素的迭代方法,用以估计大脑软组织的等效原子序数。但由于射线源所发出的光谱很宽,射束硬化效应导致其衰减值准确性降低,影响了整个方法的精度。Garcia 进一步提出了基于 K-L 展开(Karhunen-Loeve expansion, KLE)的双能 CT 方法以测量等效原子序数<sup>[6-7]</sup>。然而射束硬化伪影导致测量的等效原子序数误差较大。为进一步抑制射束硬化效应,Torikoshi 等修改了 Rutherford 的迭代方法并使用 40 和 70 keV 两种单色 X 射线测量了水的等效原子序数。但该方法仅适用于同步辐射设施,难以广泛应用。

近年来,基于光子计数探测器的能谱 CT 发展迅速<sup>[8]</sup>,并有望在临床医学和工业无损检测中得到广泛应用。相较于积分型探测器的间接转换方式(首先将 X 光转换为可见光,再将可见光转换为电荷),光子计数探测器可直接将 X 光子直接转换为电荷,并通过设置接收光子的最低能量阈值,有效抑制了转换过程中的热噪声和其他电子噪声<sup>[9]</sup>。此外,光子计数探测器可同时设置多个能量阈值,利用一次扫描即可获取积分型探测器多次扫描获取的多能谱信息,因此能谱 CT 在散射伪影抑制、射束硬化伪影抑制、虚拟单色图像生成<sup>[10]</sup>、以及材质识别<sup>[11-12]</sup>等方面相较于双能 CT 具有明显的优势。日本静冈大学的小组利用 64 通道的 CdTe 光子计数探测器和 Torikoshi 的方法在 50~70 和 120~140 keV 两种能量范围的 X 射线下测量了乙醇和水的等效原子序数,相对误差分别为 3.5% 和 5%<sup>[13]</sup>。除 Torikoshi 等所提的迭代方法外,Yamashita 等利用美国国家标准技术研究院(National Institute of Standards and Technology, NIST)的 X 射线质量衰减系数表<sup>[14]</sup>绘制了两种特定能量下不同元素的衰减系数比值曲线,并基于 transXend 探测器的能量选择特性,利用准单色 X 射线模拟单色 X 射线,获得了对应能量下不同元素的衰减系数比值,结合插值算法建立了元素衰减系数比值曲线,并完成了材料等效原子序数估计。这种方法有效降低了射束硬化效应的影响,相较于双能 CT 方法和基于同步辐射的迭代方法,精度更高<sup>[15]</sup>。但该方法必须设置很窄的能量区间(例如 0.5 keV),严重限制了探测器接收的有效光子数,导致标定与测量过程十分耗时。但待测材料的原子序数精度仍可能受重建误差、探测器响应误差、散射效应等因素影响。

基于新型 CdTe 光子计数探测器 XCounter Hydra FX20,本文提出了一种简单的材料等效原子序数测量方法。该方法根据材料的衰减特性,重新推导了两个能区下的衰减系数比值与等效原子序数的关系,且只需三种标定物即可完成关系曲线拟合。相较于双能 CT 方法<sup>[6-7]</sup>,本文方法避免了光谱测

量困难,标定过程复杂,噪声放大等缺点。相较于 Torikoshi 等基于同步辐射的迭代方法,该方法大幅降低了设备要求。相较于 Yamashita 等的方法<sup>[15]</sup>,该方法有效增加了探测器接收的有效光子数,大幅降低了标定与测量代价。实验表明,本文方法在当前扫描条件(包含管电压、管电流、几何位置)、当前标定范围(等效原子序数 6~13)下测量得到的等效原子序数相对误差在 2% 以内,具有较高可靠性。同时,本文根据含能材料样品的等效原子序数测量结果,对高衰减杂质成分进行了有效判断。结果表明,所提方法可以有效解决含能材料实际生产中的成分识别难题,并有望促进含能材料生产工艺的改进,具有重大的工程意义。

## 1 理论和方法

### 1.1 衰减系数分解

在 CT 领域,Alvarez 等已经对 X 射线与材料各种相互作用的物理机制进行了深入研究。根据其研究,X 射线在穿透物体单位距离过程中发生各种相互作用的可能性被称作衰减系数,该系数与物体的密度、组成和射线能量相关。根据成像目的,可将其分解为物理基函数或材料基函数<sup>[7]</sup>。材料基函数分解对组成未知的物体适用性较差,为提高算法通用性,本文基于物理基函数(光电吸收函数和康普顿散射函数)分解进行讨论。物体衰减系数与等效原子序数的关系可表示为

$$u(x, y, E) = \frac{Z_{\text{eff}}(x, y)\rho(x, y)}{A_{\text{eff}}(x, y)} \times (K_1 f_p(E)Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E)) \quad (1)$$

式(1)中: $u(x, y, E)$ 为 $(x, y)$ 处能量 $E$ 时物体的衰减系数, $Z_{\text{eff}}(x, y)$ 为 $(x, y)$ 处物体的等效原子序数, $\rho(x, y)$ 为 $(x, y)$ 处物体的质量密度, $A_{\text{eff}}(x, y)$ 为 $(x, y)$ 处物体的等效原子质量, $K_1$ 和 $K_2$ 为常数, $f_p(E)$ 为能量 $E$ 下的光电吸收函数值, $f_c(E)$ 为能量 $E$ 下的康普顿散射函数值<sup>[7]</sup>。

### 1.2 等效能量

当 X 射线通过路径 $L$ 穿透物体时,根据 Lambert-Beer 定律,光子计数探测器第 $j$ 个能区接收的光子数 $I_j$ 可表示为

$$I_j = \int_{E_j^{\text{Low}}}^{E_j^{\text{High}}} n_j(E) e^{-\int_L \mu(x, y, E) dx} dE, j = 1, 2, \dots, J \quad (2)$$

式(2)中: $n_j(E)$ 为第 $j$ 个能区的等效光谱(与曝光参数和探测器能区设置有关), $E_j^{\text{Low}}$ 和 $E_j^{\text{High}}$ 分别是光子计数探测器第 $j$ 个能区的光子最低能量和光子最高能量,存在 $E_j^{\text{High}} = \infty$ 。考虑到光子计数探测器每个能区均较窄,可忽略射束硬化效应的影响,将能谱 CT 每个能区的成像可近似为单能 CT 成像,此时式(2)可近似表示为

$$I_j \approx n_0(E_{\text{eff}}^j) \exp\left(-\int_{-\infty}^{\infty} u(x, y, E_{\text{eff}}^j) dx\right), j = 1, 2, \dots, J \quad (3)$$

式(3)中, $E_{\text{eff}}^j$ 为能谱 CT 在第 $j$ 个能区的等效能量,近似存在

$$E_{\text{eff}}^j = \frac{\int_{E_j^{\text{Low}}}^{E_j^{\text{High}}} n_j(E) E dE}{\int_{E_j^{\text{Low}}}^{E_j^{\text{High}}} n_j(E) dE}, j = 1, 2, \dots, J \quad (4)$$

该近似的精度取决于能区内物体衰减系数的线性度。

### 1.3 材料的等效原子序数

假设化合物或混合物由  $M$  种原子组成, 其原子序数分别为  $Z_1, Z_2, \dots, Z_M$ 。根据放射学中的 Glasser 公式, 化合物或混合物的等效原子序数  $Z_{\text{eff}}$  可以表示为

$$Z_{\text{eff}} = \left[ \frac{\sum_{m=1}^M a_m (Z_m)^4}{\sum_{m=1}^M a_m Z_m} \right]^{1/3} \quad \text{with}$$

$$a_m = (n_m A_m) / \sum_{m=1}^M (n_m A_m), \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (5)$$

式(5)中,  $a_m$  为化合物或混合物中第  $m$  种原子的质量百分比,  $A_m$  为第  $m$  种原子的原子质量,  $n_m$  为第  $m$  种原子的数目,  $Z_m$  为第  $m$  种原子的原子序数。

### 1.4 未知材料的等效原子序数测量

实际中, 对于组成未知的材料, 难以利用 Glasser 公式

$$\begin{aligned} R(x, y, E_{\text{eff}}^L, E_{\text{eff}}^H) &= \frac{\mu(x, y, E_{\text{eff}}^L)}{\mu(x, y, E_{\text{eff}}^H)} = \frac{Z_{\text{eff}}(x, y) \rho(x, y)}{A_{\text{eff}}(x, y)} (K_1 f_p(E_{\text{eff}}^L) Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E_{\text{eff}}^L)) \\ &= \frac{Z_{\text{eff}}(x, y) \rho(x, y)}{A_{\text{eff}}(x, y)} (K_1 f_p(E_{\text{eff}}^H) Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E_{\text{eff}}^H)) \\ &= \frac{K_1 f_p(E_{\text{eff}}^L) Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E_{\text{eff}}^L)}{K_1 f_p(E_{\text{eff}}^H) Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E_{\text{eff}}^H)} \\ &= \frac{f_p(E_{\text{eff}}^L)}{f_p(E_{\text{eff}}^H)} - \frac{K_2 f_p(E_{\text{eff}}^L) f_c(E_{\text{eff}}^H) / f_p(E_{\text{eff}}^H) - K_2 f_c(E_{\text{eff}}^L)}{K_1 f_p(E_{\text{eff}}^H) Z_{\text{eff}}^3(x, y) + K_2 f_c(E_{\text{eff}}^H)} \end{aligned} \quad (7)$$

式(7)中  $f_p(E_{\text{eff}}^L)$ ,  $f_p(E_{\text{eff}}^H)$  为等效能量  $E_{\text{eff}}^L$ ,  $E_{\text{eff}}^H$  下的光电吸收函数值,  $f_c(E_{\text{eff}}^L)$ ,  $f_c(E_{\text{eff}}^H)$  为等效能量  $E_{\text{eff}}^L$ ,  $E_{\text{eff}}^H$  下的康普顿散射函数值。当曝光参数和探测器能量阈值确定时(即  $n_j(E)$  确定时), 等效能量  $E_{\text{eff}}^L$ ,  $E_{\text{eff}}^H$  为常数, 进而可得  $f_p(E_{\text{eff}}^L)$ ,  $f_p(E_{\text{eff}}^H)$ ,  $f_c(E_{\text{eff}}^L)$ ,  $f_c(E_{\text{eff}}^H)$ ,  $K_1$  和  $K_2$  均为常数。因此可将式(7)简化为

$$R(x, y) = \frac{\mu_L(x, y)}{\mu_H(x, y)} = a - \frac{c}{z_{\text{eff}}^3(x, y) + b} \quad (8)$$

式(8)中:  $\mu_L(x, y)$  为  $(x, y)$  处物体在低能区等效能量  $E_{\text{eff}}^L$  下的衰减系数值,  $\mu_H(x, y)$  为  $(x, y)$  处物体在高能区等效能量  $E_{\text{eff}}^H$  下的衰减系数值, 而  $a, b, c$  为待标定参数, 满足

$$\begin{cases} a = \frac{f_p(E_{\text{eff}}^L)}{f_p(E_{\text{eff}}^H)} \\ b = \frac{K_2 f_c(E_{\text{eff}}^H)}{K_1 f_p(E_{\text{eff}}^H)} \\ c = \frac{K_2 f_p(E_{\text{eff}}^L) f_c(E_{\text{eff}}^H) / f_p(E_{\text{eff}}^H) - K_2 f_c(E_{\text{eff}}^L)}{K_1 f_p(E_{\text{eff}}^H)} \end{cases} \quad (9)$$

此时只需对三种已知材料进行扫描重建并标定即可获取标定参数  $a, b, c$ 。实验者不需要获取每个能区的等效能量和光谱数据, 只需在相同扫描条件下获取未知材料在两个能区下的 CT 图像(衰减系数), 进而获得衰减系数比值  $R(x, y)$ , 即可利用式(8)得到未知材料的等效原子序数  $z_{\text{eff}}(x, y)$ , 具体可描述为

$$z_{\text{eff}}(x, y) = \left[ \frac{c}{a - R(x, y)} - b \right]^{1/3} \quad (10)$$

实际应用本文方法时有两种选择方案: (1)利用能谱 CT 低、高能区切片图像中逐像素求  $R$  值, 进而逐像素获取物体的等效原子序数; (2)首先对能谱 CT 低、高能区切片图像进

求取其等效原子序数, 最直接的想法是基于已知组成材料的等效原子序数对其进行插值估计。根据不同穿透路径  $L$  下光子计数探测器接收的光子数, 结合式(3)和单能 CT 重建算法, 物体在能谱 CT 第  $j$  个能段下的衰减系数值  $\mu(x, y, E_{\text{eff}}^j)$  即为该能段切片图像对应位置的灰度值。对于只有两个能区的光子探测器 XCounter Hydra FX20 而言, 一次扫描重建即可同时获得物体在能谱 CT 低能区的衰减系数  $\mu(x, y, E_{\text{eff}}^L)$  和能谱 CT 高能区的衰减系数  $\mu(x, y, E_{\text{eff}}^H)$ 。受 Yamashita 等的启发<sup>[15]</sup>, 能谱 CT 两个能区的衰减系数比值  $R(x, y, E_{\text{eff}}^L, E_{\text{eff}}^H)$  可描述为

$$R(x, y, E_{\text{eff}}^L, E_{\text{eff}}^H) = \frac{\mu(x, y, E_{\text{eff}}^L)}{\mu(x, y, E_{\text{eff}}^H)} \quad (6)$$

与 Yamashita 的方法<sup>[15]</sup> 不同的是, 本文将式(1)代入式(6), 且考虑到相同位置处的  $Z_{\text{eff}}(x, y)$ ,  $\rho(x, y)$  和  $A_{\text{eff}}(x, y)$  相同, 因此可得

行分割, 求出各分割区域的平均  $R$  值, 进而求解该分割区域的平均等效原子序数。实际应用时应选择第一种方案。第二种方案存在部分缺点: ①切片图像中可能含有多种材料和杂质, 且杂质的灰度可能变化较大, 因此对切片图像进行分割难度较大且精度难以保证; ②分区求解只能获取该区域的平均等效原子序数, 而无法获取杂质等效原子序数的变化范围(一般而言, 杂质的等效原子序数是变化的), 不利于杂质种类的判断。因此第一种方案更有利于杂质原子序数获取。

## 2 实验部分

为了减小射束硬化伪影对标定结果的影响, 实验中金属铝的尺寸为  $\phi 5$  mm, 金属钛的尺寸为  $\phi 2$  mm, 其他零件尺寸均为  $\phi 10$  mm。三组实验的重建参数均为: 射线源至旋转中心距离为 175.00 mm; 射线源至探测器距离为 420.00 mm; 探测器像素尺寸为 0.10 mm; 重建体素尺寸为 0.041 67 mm; 微焦点 X 射线源型号为滨松 (HAMAMATSU) L12161-07; 管电压为 150 kVp, 管电流为 150  $\mu$ A, 光子计数探测器型号为 XCounter Hydra FX20, 采集速度为 20 帧  $\cdot$   $s^{-1}$ , 20 帧图像求和并取反对数得到一幅投影图像; 单幅投影大小为 1 024  $\times$  64 (裁剪后); 投影总幅数为 900 幅; 重建矩阵大小为 1 024  $\times$  1 024  $\times$  64; 能谱 CT 的低能量阈值为 60 keV, 高阈值为 100 keV, 因此其低能区为 60~100 keV, 高能区为 100~150 keV。

### 2.1 实验一

本实验扫描对象由尼龙 6、聚四氟乙烯、金属铝、金属钛、有机玻璃、未知物共 6 种材料的零件组成。常见含能材

料的等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  主要在 6~12 之间, 因此本文选定尼龙 6、聚四氟乙烯、金属铝为标定物。三种标定物的化学式、等效原子序数和衰减比值  $R$  如表 1 所示。

利用三种标定物的等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  和衰减比值  $R$  对式 (8) 进行标定, 可得标定参数  $a = 6.435$ ,  $b = 23\ 680$ ,  $c = 128\ 100$ 。结合本实验的能谱 CT 低、高能区切片图像, 通过

式(9)即可测量得到不同材料的等效原子序数  $z_{\text{eff}}$ 。结果如图 1 所示: 其中图 1(a)为能谱 CT 低能区切片图像, 灰度窗口  $[0, 2.75]$ ; 图 1(b)为能谱 CT 高能区切片图像, 灰度窗口  $[0, 1.48]$ ; 图 1(c)为衰减比值  $R$  图像, 灰度窗口  $[0, 2.37]$ ; 图 1(d)为测量得到的等效原子序数图像, 灰度窗口  $[0, 19.89]$ 。

表 1 实验一标定物的化学式、等效原子序数和衰减比值

Table 1 Chemical formulas, equivalent atomic numbers and linear attenuation coefficient ratios of calibration materials in the first experiment

标定物	化学式	等效原子序数	低能区衰减/cm <sup>-1</sup>	高能区衰减/cm <sup>-1</sup>	衰减比值 $R$
尼龙 6	$-\text{NH}-(\text{CH}_2)_5-\text{CO}-$	6.600 8	$0.185\ 4 \pm 0.002\ 8$	$0.169\ 9 \pm 0.002\ 9$	$1.091\ 2 \pm 0.004\ 0$
聚四氟乙烯	$-\text{CF}_2-\text{CF}_2-$	8.616 3	$0.364\ 9 \pm 0.002\ 9$	$0.312\ 3 \pm 0.002\ 8$	$1.168\ 4 \pm 0.007\ 1$
铝	Al	13	$0.796\ 9 \pm 0.004\ 0$	$0.536\ 5 \pm 0.000\ 28$	$1.485\ 4 \pm 0.001\ 9$

图 1 中钛和有机玻璃均为已知材料, 可用其等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  评估本实验的相对误差。测量得到的各零件材料衰减比值  $R$ 、等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  及其相对误差如表 2 所示(结果为红色方框位置所有像素的平均值及其标准差)。从表 2 中可得本实验结果中钛的等效原子序数为  $16.323\ 2 \pm 0.014\ 4$ (实际等效原子序数为 22), 相对误差为 25.803 6%; 有机玻璃等效原子序数为  $6.894\ 0 \pm 0.128\ 2$ (实际等效原子序数为 6.942 0), 相对误差为 0.691 4%。

2.2 实验二

本实验同时扫描 6 个零件, 其零件号分别为 22F、22、F2314、Al、22F+F2314、聚四氟乙烯。对于前五个零件, 本文不方便公布其组成, 仅以代号进行区分, 在一定程度上可将其视为组成未知的含能材料。本实验所有条件与实验一相同, 因此可直接采用实验一的标定参数, 即:  $a = 6.435$ ,  $b = 23\ 680$ ,  $c = 128\ 100$ 。利用上述标定参数和本实验能谱 CT 低、高能区的切片图像, 通过式(9)可得各零件材料的等效原子序数, 结果如图 2 所示: 其中图 2(a)为能谱 CT 低能区切片图像, 灰度窗口  $[0, 1.375]$ ; 图 2(b)为能谱 CT 高能区切片图像, 灰度窗口  $[0, 0.69]$ ; 图 2(c)为衰减比值  $R$  图像, 灰度窗口  $[0, 1.98]$ ; 图 2(d)为测量的等效原子序数图像, 灰

度窗口  $[0, 17.17]$ 。

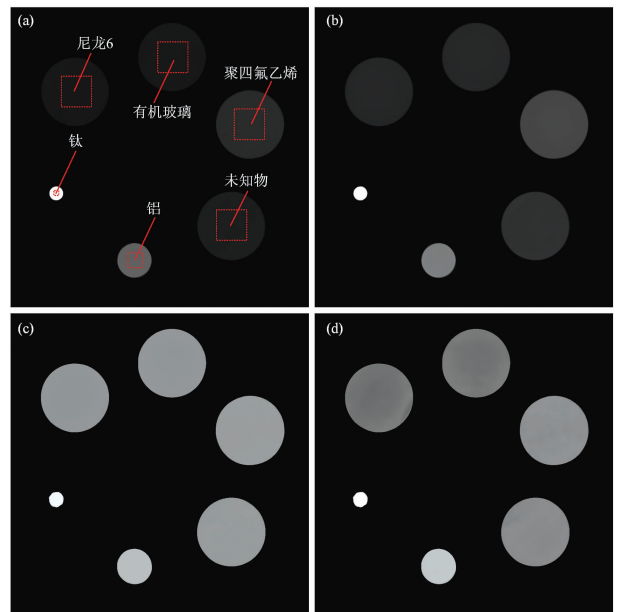


图 1 实验一测量结果

Fig. 1 Measurement results of the first experiment

表 2 测量得到的各零件材料衰减比值、等效原子序数及其相对误差

Table 2 The measured linear attenuation ratios, equivalent atomic numbers and relative errors for materials

零件材料	低能区衰减/cm <sup>-1</sup>	高能区衰减/cm <sup>-1</sup>	衰减比值	标定的等效原子序数	相对误差/%
钛	$2.553\ 5 \pm 0.033\ 8$	$1.369\ 0 \pm 0.017\ 2$	$1.865\ 2 \pm 0.001\ 9$	$16.323\ 2 \pm 0.014\ 4$	25.803 6
有机玻璃	$0.192\ 8 \pm 0.002\ 0$	$0.175\ 4 \pm 0.001\ 8$	$1.099\ 2 \pm 0.004\ 1$	$6.894\ 0 \pm 0.128\ 2$	0.691 4
未知材料	$0.244\ 9 \pm 0.002\ 9$	$0.213\ 8 \pm 0.002\ 3$	$1.145\ 5 \pm 0.002\ 0$	$8.132\ 1 \pm 0.045\ 9$	—

图 2 中铝和聚四氟乙烯均为已知材料, 可用其等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  评估本实验的相对误差。测量得到的各零件材料衰减比值  $R$ 、等效原子序数  $z_{\text{eff}}$  和相对误差如表 3 所示(结果为红色方框内所有相似的平均值)。特别的, 为了减小射束硬化伪影的影响, F2314 红色方框相对位置与 22F+F2314 中的 F2314 红色方框相对位置接近, 都放置在零件边缘。

由表 3 可知, 铝的等效原子序数相对误差为 0.719 2%; 聚四氟乙烯的等效原子序数相对误差为 0.839 1%; 22F 测量的等效原子序数为  $7.753\ 5 \pm 0.102\ 7$ , 混合物 22F+F2314 中的 22F 测量的等效原子序数为  $7.660\ 5 \pm 0.105\ 0$ , 两者相差 1.119 9%; F2314 测量的等效原子序数为  $11.281\ 1 \pm 0.112\ 1$ , 混合物 22F+F2314 中的 F2314 测量的等效原子序

数为  $11.3794 \pm 0.02141$ ，两者相差  $0.8714\%$ 。结果表明，相同扫描条件下，利用本文方法获得的标定参数可将等效原子序数相对误差控制在  $2\%$  以内，因此本文等效原子序数测量方法是有效的。同时可发现，22 中杂质的低能区衰减、高能区衰减和衰减比值均远高于铝和常规含能材料。根据等效原子序数测量结果，其等效原子序数约为  $15.7332 \pm 1.5892$  (等效原子序数最大值高达  $17.3224$ ，甚至高于实验一所标定的钛)，远高于铝和常规含能材料。因此可确定 22 中的高衰减杂质是含能材料生产过程中混入的高原子序数杂质，从而排除了含能材料高聚集的猜想。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 可靠性判断

本文的两组实验均在相同管电压和探测器能量阈值下进行，实验一利用尼龙 6、聚四氟乙烯和铝三种材料实现了衰减比值  $R$  与等效原子序数  $Z_{\text{eff}}$  关系曲线的标定，实验二直接采用实验一标定的关系曲线，实现了未知材料的等效原子序数测量。实验结果均表明本文等效原子序数测量方法在当前扫描条件、当前标定范围内 (等效原子序数范围为  $6 \sim 13$ )，可将等效原子序数的相对误差控制在  $2\%$  以内，具有较高可

靠性，具备了一定的工业实际应用价值。

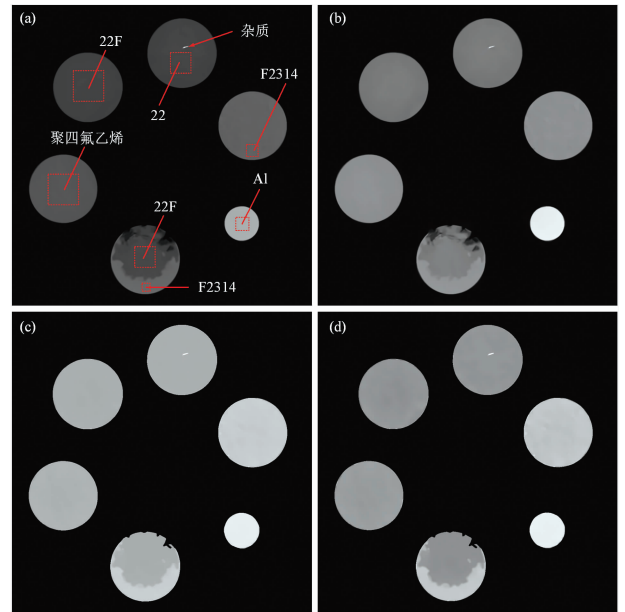


图 2 实验二测量结果

Fig. 2 Measurement results of the second experiment

表 3 测量得到的各零件材料衰减比值、测量的等效原子序数和相对误差

Table 3 The measured linear attenuation ratios, equivalent atomic numbers and relative errors for materials

零件组成	低能区衰减/ $\text{cm}^{-1}$	高能区衰减/ $\text{cm}^{-1}$	衰减比值	测量的等效原子序数	相对误差/ $\%$
铝	$0.7898 \pm 0.0047$	$0.5288 \pm 0.0036$	$1.494 \pm 0.0027$	$13.0935 \pm 0.0272$	$0.7192$
聚四氟乙烯	$0.3658 \pm 0.0035$	$0.3142 \pm 0.0042$	$1.1642 \pm 0.0066$	$8.5440 \pm 0.1369$	$0.8391$
22 中的主体	$0.2987 \pm 0.0062$	$0.26132 \pm 0.0048$	$1.1428 \pm 0.0049$	$8.0681 \pm 0.1157$	—
22 中的杂质	$0.9558 \pm 0.2890$	$0.5340 \pm 0.1242$	$1.7894 \pm 0.1814$	$15.7332 \pm 1.5892$	—
22F	$0.2977 \pm 0.0015$	$0.2635 \pm 0.0018$	$1.1298 \pm 0.0040$	$7.7535 \pm 0.1027$	—
F2314	$0.4120 \pm 0.0031$	$0.3087 \pm 0.0030$	$1.3346 \pm 0.0087$	$11.2811 \pm 0.1121$	—
22F+F2314 中的 22F	$0.3069 \pm 0.0024$	$0.2725 \pm 0.0022$	$1.1262 \pm 0.0040$	$7.6605 \pm 0.1050$	$1.1199$
22F+F2314 中的 F2314	$0.4431 \pm 0.0023$	$0.3301 \pm 0.0017$	$1.3423 \pm 0.0017$	$11.3794 \pm 0.02141$	$0.8714$

#### 3.2 误差影响因素

本方法中的衰减比值图像是利用能谱 CT 低、高能区切片图像的对应像素灰度相除获取的，因此能谱 CT 低、高能区切片图像质量将直接影响等效原子序数测量结果。根据现有能谱 CT 理论，影响能谱 CT 低、高能区切片图像质量的因素包括：切片噪声、射束硬化效应、散射效应、重建误差、零件尺寸和 K-edge 效应。为降低切片噪声的影响，可采取增大 X 射线剂量、图像降噪、迭代重建等诸多手段抑制能谱 CT 低、高能区切片的噪声。为降低射束硬化效应和散射效应的影响，应选取恰当的探测器能量阈值，且零件直径不应超过本文标定范围 ( $10 \text{ mm}$ )。特别的，当扫描对象中包含 K-edge 能量高的材料时，材料的 K-edge 效应不可忽略，该方法不再适用<sup>[14]</sup>。本文方法虽然在推导阶段没有考虑切片重建误差、探测器响应误差、射束硬化效应和散射效应等因素，但由于标定实验与测量实验是相同成像条件下进行的，

相当于将上述影响因素纳入了标定曲线，因此本文方法在很大程度上抑制了上述因素对最终结果的影响。

### 4 结论

本文方法在实际应用中不依赖于能谱 CT 的专业知识，鲁棒性和通用性强；同时利用较宽的探测器能区进行扫描成像，较充分的利用了 X 射线源所发出的光子，使检测效率满足了工业无损检测和医学成像的实际需求，具有良好的商业应用前景。特别的，在含能材料实际生产检测中，本文提出的等效原子序数测量方法，对含能材料生产中的高衰减杂质成分进行了有效判断，并指出了高衰减杂质是实际生产过程中混入的高原子序数杂质，而非高聚集的含能材料。这对后续含能材料生产工艺改进具有重要指导意义。

## References

- [ 1 ] SHAO Shang-kun, SUN Xue-peng, DU Xiao-guang, et al(邵尚坤, 孙学鹏, 杜晓光, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2020, 40(12): 3936.
- [ 2 ] QI Jun-cheng, LIU Bin, CHEN Rong-chang, et al(戚俊成, 刘 宾, 陈荣昌, 等). Acta Physica Sinica(物理学报), 2019, 68(2): 024202.
- [ 3 ] Taguchi K. Radiological Physics and Technology, 2017, 10(1): 8.
- [ 4 ] Zhao W, Vernekohl D, Han F, et al. Medical Physics, 2018, 45(7): 2964.
- [ 5 ] Mendonca P R, Lamb P, Sahani D V. IEEE Transactions on Medical Imaging, 2014, 33(1): 99.
- [ 6 ] Bornefalk H. Medical Physics, 2012, 39(2): 654.
- [ 7 ] Garcia L I R, Azorin J F P, Almansa J F. Physics in Medicine & Biology, 2016, 61(1): 265.
- [ 8 ] Ballabriga R, Aloyz J, Campbell M, et al. Journal of Instrumentation, 2016, 11: 01007.
- [ 9 ] Ehn S, Sellerer T, Mechlem K, et al. Physics in Medicine and Biology, 2017, 62(1): N1.
- [10] Gutjahr R, Halaweish A F, Yu Z, et al. Investigative Radiology, 2016, 51(7): 421.
- [11] Bousset L, Coulon P, Thran A, et al. British Journal of Radiology, 2014, 87(1040): 20130798.
- [12] Pourmorteza A, Symons R, Sandfort V, et al. Radiology, 2016, 279: 239.
- [13] Kan K, Imura Y, Morii H, et al. World Journal of Nuclear Science and Technology, 2013, 3(3): 106.
- [14] Hubbell J H, Seltzer S M. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2004, NISTIR 5632. [Online] available: [https://www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients\[2020-7-20\]](https://www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients[2020-7-20]).
- [15] Yamashita Y, Kimura M, Kitahara M, et al. Journal of Nuclear Science and Technology, 2014, 51(10): 1256.

## Effective Atomic Number Measurement of Energetic Material Using Photon Counting Spectral Computed Tomography

YANG Ya-fei<sup>1, 2</sup>, ZHANG Cai-xin<sup>1\*</sup>, CHEN Hua<sup>1</sup>, ZHANG Wei-bin<sup>1</sup>, TIAN Yong<sup>1</sup>, ZHANG Ding-hua<sup>2, 3</sup>, HUANG Kui-dong<sup>2, 3\*</sup>

1. Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China
2. Key Laboratory of High Performance Manufacturing for Aero Engine, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China
3. Engineering Research Center of Advanced Manufacturing Technology for Aero Engine, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China

**Abstract** Dual-energy computer tomography (CT) or spectral CT can obtain the equivalent atomic number of materials, which is very important for the composition detection and production process improvement of energetic materials. However, the existing methods have some disadvantages, such as high complexity, high equipment requirements. In order to improve the measurement accuracy of equivalent atomic numbers, and reduce the equipment requirements and algorithm complexity, a simple method based on the new CdTe photon counting detector is proposed to obtain the equivalent atomic number of materials. In this method, the relationship between the linear attenuation coefficient ratio in two energy bins and the equivalent atomic number is re-deduced using the attenuation characteristics of materials. This method does not rely on the professional knowledge of dual-energy CT or spectral CT. Only the photon-counting detector is used to scan and reconstruct the spectral CT of three known materials, the calibration curve of the equivalent atomic number can be obtained, and the equivalent atomic number of unknown materials can be measured. In practical application, as long as the calibration experiment and measurement experiment are carried out under the same scanning conditions, the influencing factors such as reconstruction errors, detector response errors, beam hardening effects, and scattering effects can be included in the calibration curve (equivalent to re-calibrating the National Institute of Standards and Technology data under specific scanning conditions), and the influence of above factors on the final result can be restrained. Compared with other methods, this method is more robust and versatile and greatly reduces equipment requirements and algorithm complexity. At the same time, energy bins allowed by this method are relatively wide, which can make full use of the photons emitted by the detector. Therefore, this method makes the detection efficiency meet the needs of industrial detection and medical imaging and has a good commercial application prospect. The experimental results show that relative errors of

equivalent atomic numbers measured by this method are less than 2% and have high reliability under current calibration ranges (equivalent atomic number 6~13) and scanning conditions. In the actual production detection of energetic materials, this method effectively judged the high-attenuation impurities without destroying the energetic materials. It is pointed out that the high-attenuation impurities are high-atomic number impurities mixed in the actual production process, rather than high-density concentrated energetic materials. This shows that this method can effectively solve the problem of composition detection in the actual production and testing of energetic materials and is expected to promote the improvement of the energetic material production process, which has great engineering significance.

**Keywords** Photon counting spectral computer tomography; Energetic materials; Equivalent atomic number; Impurity identification

(Received Feb. 3, 2021; accepted Nov. 8, 2021)

\* Corresponding authors