

使用多能量X射线透射技术对叠加状态下的铜、铁和石材厚度估算的可行性研究

高 骏

北京工业大学信息科学技术学院, 北京

收稿日期: 2025年2月8日; 录用日期: 2025年3月1日; 发布日期: 2025年3月11日

摘 要

自然界中, 铜和铁元素常以伴生状态存在于矿石中。为了估算铜铁伴生矿中的元素含量, 准确估算铜、铁和石材在叠加状态下的厚度至关重要。本文提出了一种基于多能量X射线透射(ME-XRT)原理的厚度估算方法, 利用光子计数探测器(PCD)采集多能量数据, 并结合机器学习算法进行系数修正。该方法包括多能量区间的X射线衰减图像获取、图像预处理、特征提取以及基于机器学习的系数修正。实验结果表明, 该方法能够有效估算三种材料叠加状态下的厚度分布。

关键词

光子计数探测器, 多能量X射线成像, 厚度估算, 叠加材料, 机器学习

Feasibility Study of a Method for Thickness Estimation of Copper, Iron, and Stone in Superimposed State with ME-XRT

Jun Gao

School of Information Science and Technology, Beijing University of Technology, Beijing

Received: Feb. 8th, 2025; accepted: Mar. 1st, 2025; published: Mar. 11th, 2025

Abstract

In nature, copper and iron elements often coexist in ores. To estimate the elemental content in copper-iron associated ores, accurately determining the thickness of copper, iron, and stone in an overlapping state is crucial. This paper proposes a thickness estimation method based on the principle of Multi-Energy X-ray Transmission (ME-XRT), which utilizes a Photon Counting Detector (PCD) to

文章引用: 高骏. 使用多能量 X 射线透射技术对叠加状态下的铜、铁和石材厚度估算的可行性研究[J]. 传感器技术与应用, 2025, 13(2): 77-92. DOI: 10.12677/jsta.2025.132010

acquire multi-energy data and combines machine learning algorithms for coefficient correction. The method includes the acquisition of X-ray attenuation images in multiple energy ranges, image preprocessing, feature extraction, and coefficient correction based on machine learning. Experimental results show that the proposed method can effectively estimate the thickness distribution of the three materials in an overlapping state.

Keywords

Photon-Counting Detectors, Multi-Energy X-Ray Imaging, Thickness Estimation, Superimposed Materials, Machine Learning

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

铜和铁在自然界中常以伴生状态存在于矿石中[1]。准确估算矿石中具有经济价值元素的含量，是智能化矿石分选[2]的重要基础。然而，估算元素含量的前提是准确获取元素在矿石中的厚度分布。

目前，已有多项研究针对材料厚度估算展开。Schena [3]等人采用单色 X 射线源结合双能量探测器(DE-XRT)，对矿石中石料和有价值元素的厚度进行估算。然而，工业中常用的多色 X 射线源使其推广性受限，且该方法仅适用于两种材料的厚度识别，难以满足更复杂的工业需求。Scott [4]等人通过在 X 射线路径中引入多吸收板(MAP)，结合机器学习算法，从标准灰度图像中提取材料类型和厚度信息。然而，这种方法需要精密的机械装置来确保吸收板的准确定位，增加了工业设计和调试的复杂性。此外，MAP 方案在动态样品检测和样品快速切换中表现出局限性。

对于原子序数接近的物质(如铜和铁，原子序数分别为 29 和 26)，DE-XRT 因能量分离能力较差，难以区分这两种材料。在有限的能量区间内，铜与铁的 X 射线衰减曲线往往较为相似，导致物质识别困难。针对类似问题，Yeyu [5]等人通过多能量 X 射线透射(ME-XRT)方法，将能谱划分为五个区间，并利用机器学习实现了镁(原子序数 12)和铝(原子序数 13)的分类。然而，该方法仅解决了单一物质的二分类问题，无法处理多种物质叠加时的厚度估算。

Sim [6]等人基于 X 射线吸收技术，研究了半导体组件中多层结构的厚度测定。在硅 - 铜 - 锡(Si-Cu-Sn)和银 - 锡 - 铜(Ag-Sn-Cu)组合中，他们实现了铜和锡的最小厚度分辨率，分别为 0.001 mm。然而，该研究存在一些局限性。在测量多层结构中的某一层厚度时，需要预先知道其他两层的材料类型和厚度。除非这些参数保持恒定，否则无法准确测量目标层的厚度。在实际应用中，这可能增加测量的复杂性和不确定性，尤其是在材料类型或厚度可能发生变化的情况下。此外，尽管该技术在铜和锡层的测量中能够达到 0.001 毫米的高精度，这一精度在微电子和半导体领域具有重要意义，但对于其他领域(如宏观结构或厚材料)，这种高精度可能不适用。例如，对于较厚的材料(如几毫米或更厚的金属板)，单色射线的假设可能不再成立，从而导致测量分辨率不足或测量范围受限。

本文提出了一种基于光子计数探测器(PCD) [7]的新方法，通过采集多能量区间数据并结合机器学习技术，拟合有效衰减系数。该方法不仅能够同时实现铜、铁、石料三种物质的分类，还可以估算其在叠加状态下的厚度分布。这一创新为矿石中价值元素的含量估算提供了可靠手段，并为其他相关领域的应用开辟了新的可能性。

与现有方法相比,本研究提出的方法具有显著优势:首先,它不依赖单色射线源和多吸收板,从而避免了传统技术因复杂硬件设备而带来的高成本和操作难度。其次,本方法能够处理多种物质(超过两种)在叠加状态下的厚度估算,具有较宽的厚度范围,因此具有较强的泛化能力,可能为大部分领域的应用提供启发。此外,本方法在估算多材料叠加时的目标材料厚度时,无需已知其他非目标材料的厚度,进一步降低了操作中的不确定性和复杂性,使其在动态样品检测和工业应用中更具优势。

2. 材料与方法

2.1. 实验设置

用于测量多能量 X 射线透射信号的测量系统是本文实验中使用的 XRT 智能分类平台,该平台是由我们实验室先前开发的,其横截面示意图如图 1 所示。主要组件包括扇形 X 射线源、具有 20 至 160 keV 能量响应范围的线性阵列 PCD, 以及一个传送带。X 射线源距传送带下方 43.5 厘米,线性阵列 PCD 距传送带上方约 57 厘米。在这项工作中, X 射线管的电压设置为 160 kV, 电流设置为 1 mA。

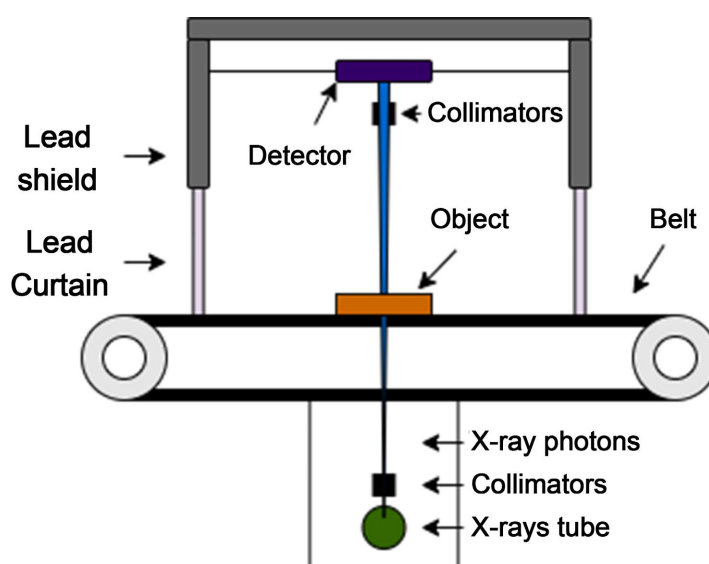


Figure 1. Sketch of experimental measurement system.
图 1. 实验测量系统示意图

本研究使用了 pitch 为 0.8 mm 的 1×128 像素的 CdTe 线性阵列 PCD, 该款探测器由 Detection Technology 公司研发, 型号为 ME3。可通过配套软件, 设置为 High Energy Resolution (HER) 模式。HER 模式可将 20 keV 至 160 keV 的 X 射线能谱划分为 128 个能量区间。该探测器由半导体材料制成, 将吸收的光子能量转换为电荷。当 X 射线光子进入探测器时, 它们与探测器的相互作用产生电子 - 空穴对的电荷云。电荷云可以被电场引导到像素电极处, 形成一个脉冲[8]。在理想情况下, 由单个光子生成的一个电荷云垂直进入一个像素电极并生成一个脉冲。图 2 展示了探测器的单个像素中的情况。在半导体的电极之间施加高电压偏置。由此产生的电场使电荷云在电极上集中。到达像素电极的电子电荷云产生一个信号, 该信号被放大并转换为电压, 电压信号经由“脉冲整形器”塑造成一个脉冲。整形后的脉冲随后被发送到一个“比较器”, 该比较器通过脉冲的高度测量能量值。然后, “计数器”测量有多少个脉冲的波高超过预设的能量阈值。在读出时间结束时, 每个通道的测量值是在设定的阈值水平以上检测到的光子数量(图 2(a)), 这意味着最终可以得到 128 个能量区间, 如图 2(b)所示。

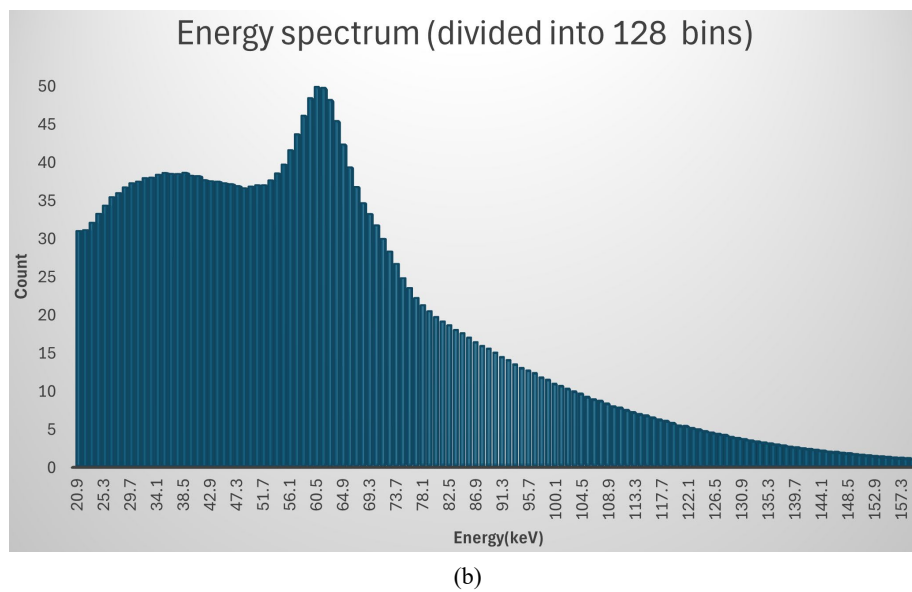
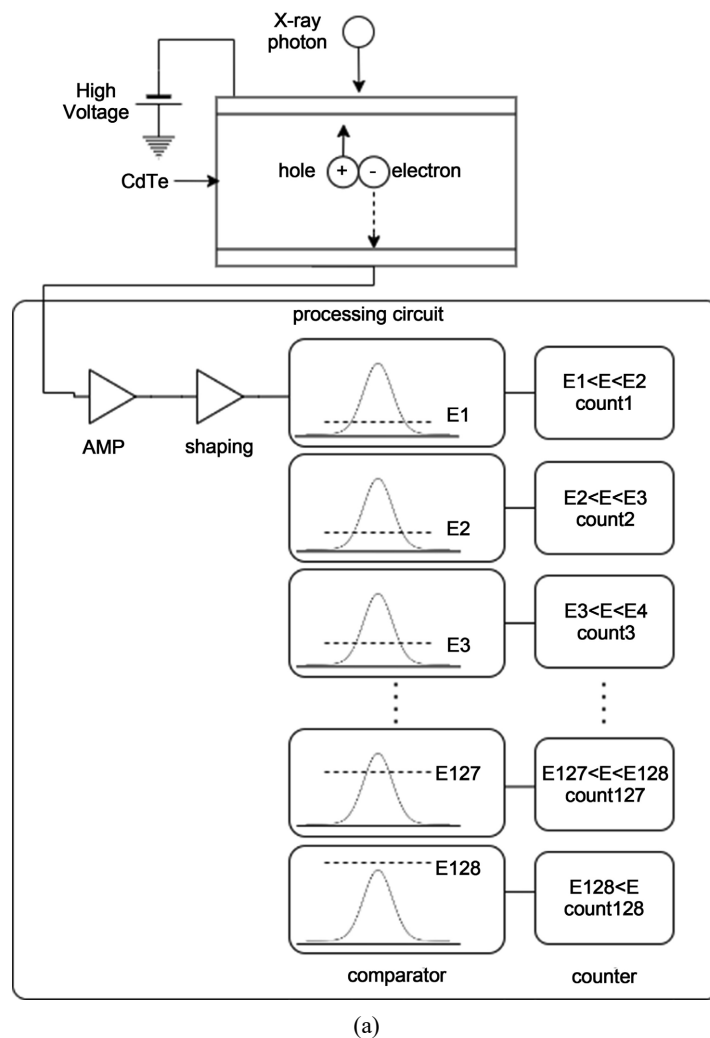


Figure 2. Schematic of X-ray signal detection based on photon counting detector
图 2. 基于光子计数探测器的 X 射线信号检测原理图

2.2. 样品

本研究使用的标准测试体为 100 mm*100 mm 的高纯铜板(Cu 含量 $\geq 99.99\%$), 100 mm*100 cm 高纯铁板(Fe 含量 $\geq 99.9\%$)和直径为 14 mm 的石片测试体。其中, 石片测试体, 由铜铁伴生矿石, 经过粉碎机粉碎成粉末, 并由压片机压制成直径为 14 毫米的不同厚度的石片测试体。图 3 展示了铜样品, 铁样品以及石头样品。图 4 展示了制作石片测试体的仪器, 粉碎机和压片机。表 1 展示了选取的铜样本, 铁样本, 以及石片样本的厚度。为采集铜, 铁, 石头不同厚度叠加的 X 射线衰减数据, 将不同厚度的测试体进行了排列组合, 共产生 128 种排列组合。排列组合情况见图 5。

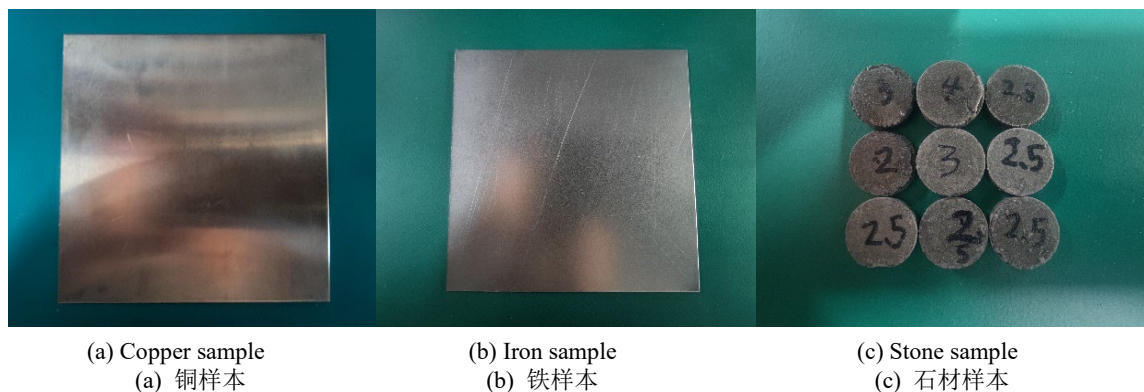


Figure 3. Copper, iron, and stone samples

图 3. 铜、铁和石材样本



Figure 4. Equipment for stone powder pulverization and tablet compression

图 4. 石材粉碎及压片设备

Table 1. Thickness of the sample

表 1. 样品的厚度

Sample	Thickness(mm)
Cu	0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2, 2.2, 2.4, 2.6, 2.8, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
Fe	0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2, 2.2, 2.4, 2.6, 2.8, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
Stone	2, 4, 6.5, 9, 11.5, 14, 17.5, 20.5, 24.5

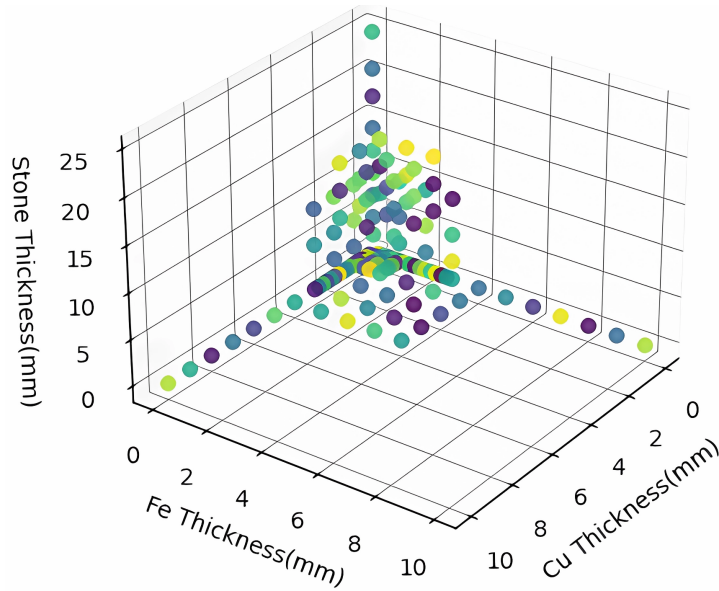


Figure 5. Thickness overlay of copper, iron, and stone samples
图 5. 铜、铁和石材样品的厚度叠加图

2.3. 数据处理

本研究使用了 ME3 探测器配套的软件开发包(SDK), 开发了自定义代码, 生成了包含 128 个能量区间信息的 X 射线图像。如图 6 所示。



Figure 6. X-ray data of 128 energy bins
图 6. 128 个能量箱的 X 射线数据

衰减系数是描述 X 射线穿过物质时强度衰减的重要参数。本研究旨在通过实验测量的透射数据, 计算穿透铜、铁、石料的衰减系数, 为进一步分析其厚度提供依据。Lambert-Beer's law [9] (见公式(1))描述了 X 射线透过物体时的衰减规律。其中 I_0 表示没有样品时的探测器计数值, I 表示 X 射线穿透样品后测量得到的探测器计数值。

$$I(E) = I_0(E)e^{-\mu(E)t} \quad (1)$$

经过变换, 可获得公式(2)。

$$\tau(E) = \ln \frac{I_0(E)}{I(E)} = \mu(E)t \quad (2)$$

在公式(2)中, $\tau(E)$ 是光学厚度, $I_0(E)$ 和 $I(E)$ 分别表示没有样品时的探测器计数值和 X 射线穿透样品后测量得到的探测器计数值, E 是光子能量, $\mu(E)$ 是材料的能量依赖性衰减系数, t 是材料厚度。

该公式仅在单色 X 射线[10]条件下成立。在单色条件下, $\mu(E)$ 是物质的固有属性, 光学厚度 $\tau(E)$ 与厚度 t 呈线性关系。

然而, 在多色 X 射线条件下, 普通的单能或双能 X 射线探测器会在用户选择的积分时间内, 对沉积在每个像素上的总能量进行积分测量。这意味着探测器记录的是像素内的总能量沉积, 而非实际的能量

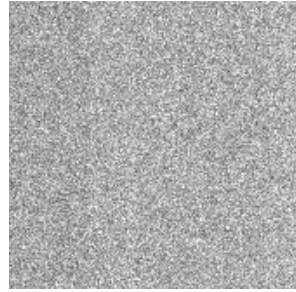
谱分布。因此,在多色条件下,公式(2)中的材料属性项 $\mu(E)$ 和厚度项 t 无法解耦。

这一局限性导致,在单个二维投影中,薄的高密度材料和厚的低密度材料难以区分,从而限制了多色X射线成像的直接应用。

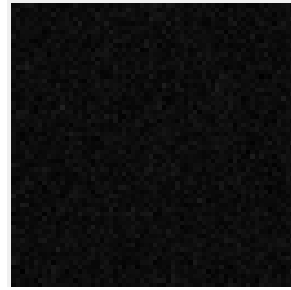
为了解决这一问题,本文通过使用光子计数探测器(PCD),将20 keV至160 keV的能谱范围划分为128个能量区间,并假设每个区间的X射线近似为单色。

这一假设的合理性源于PCD的工作原理,其能够以高精度分辨并计数入射光子的能量,从而实现对能谱的精细划分。然而,该近似假设仅在所选择的能量区间足够窄且光谱硬化效应[11][12]可以忽略的情况下成立。若能量区间较宽,则可能导致显著偏差。

为了计算每个能量区间的光学厚度 $\tau(E)$,我们开发了一种图像切割工具。对于铜板和铁板,该工具能够在每个能量区间切割出大小为 64×64 的图像切片,每个切片包含4096个像素。这些切片分为两类:一类是无材料时的切片,另一类是X射线透过材料后的切片。切割后的图像如图7所示,其中图7(a)展示了bin1能量区间中无材料的切片,图7(b)则展示了该能量区间下,X射线透过1 mm铜板后的切片。由于石片直径仅为14 mm,从石片中切割出的切片包含的像素数量明显少于铜板和铁板,切片大小为 28×28 ,共784个像素。由于不同厚度的铜板、铁板和石片共有128种厚度组合,每种厚度组合下包含128个能区的切片,每个能区又包括无材料时的切片和X射线透过材料后的切片,因此总共会产生 $128 \times 128 \times 2 = 32,768$ 个切片。



(a) Slice without material (bin1)
(a) 无材料切片(bin1)



(b) Slice after passing through 1 mm copper (bin1)
(b) 通过1毫米铜后的切片(bin1)

Figure 7. Slices generated after being cut by a cutting tool
图 7. 经过图像切割工具切割后生成的图像切片

通过公式(3),可以利用切割后的图像数据计算每个能区的光学厚度 τ_i 。

$$\tau_i = \ln \left(\frac{\sum_p^N I_{0,i,p}}{\sum_p^N I_{i,p}} \right) \quad (1 \leq i \leq 128) \quad (3)$$

其中, i 表示能量区间的索引, p 表示图像中像素的索引, $I_{0,i,p}$ 表示对应能量区间 i 和像素 p 处没有物质时的探测器计数值, $I_{i,p}$ 表示对应能量区间 i 和像素 p 处有物质时的探测器计数值。

根据公式(3),我们计算了1~10 mm(步进1 mm)铜样品和铁样品在全部128个能区的 τ ,以及石片样品在不同厚度(2 mm, 4 mm, 6.5 mm, 9 mm, 11.5 mm, 14 mm, 17.5 mm, 20.5 mm, 24.5 mm)下的全部128个能区的 τ 。

针对每个能区,我们计算了在不同厚度下的光学厚度 τ ,并使用Python对每个能区在所有厚度上的数据拟合了 $y = ax$ 形式的直线(其中 y 表示光学厚度 τ , x 表示厚度 t , a 表示衰减系数 $\mu(E)$)。为了衡量

拟合的优劣，我们使用了 R^2 值，定义为：

$$R^2 = \left(\frac{\sum (y_{\text{true}} - \bar{y}_{\text{true}})(y_{\text{pred}} - \bar{y}_{\text{pred}})}{\sqrt{\sum (y_{\text{true}} - \bar{y}_{\text{true}})^2 \sum (y_{\text{pred}} - \bar{y}_{\text{pred}})^2}} \right)^2 \quad (4)$$

R^2 是拟合曲线与实际数据之间的相关性的度量，值越接近 1，表示拟合效果越好。对于铜、铁和石片样品，我们分别选取了拟合结果中 R^2 值最高的前 8 个 $\mu(E)$ 系数，以确定拟合效果最好的衰减系数(即线性度最佳)。通过这种方法，我们获得了每个样品在各个能区的 $\mu(E)$ 系数。

对于铜、铁和石片样本，我们从 8 个拟合效果最好的能区中选取了前 2 个能区对应的函数拟合曲线作为展示。铜样本的拟合曲线见图 8，铁样本的拟合曲线见图 9，石样本的拟合曲线见图 10。

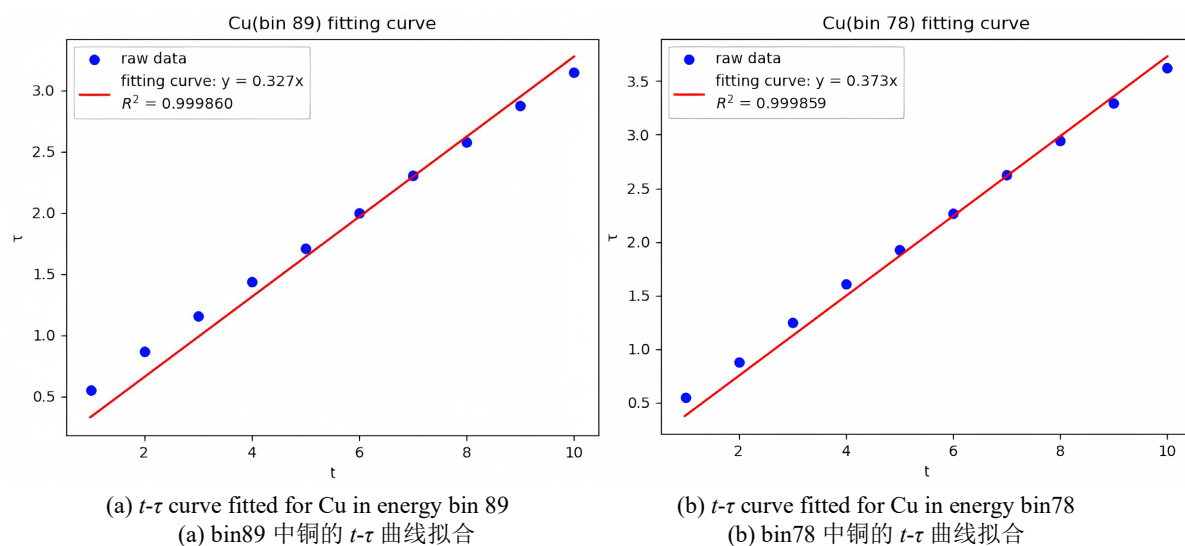


Figure 8. Best linear fit curve for the copper sample

图 8. 铜样本的最佳线性拟合曲线

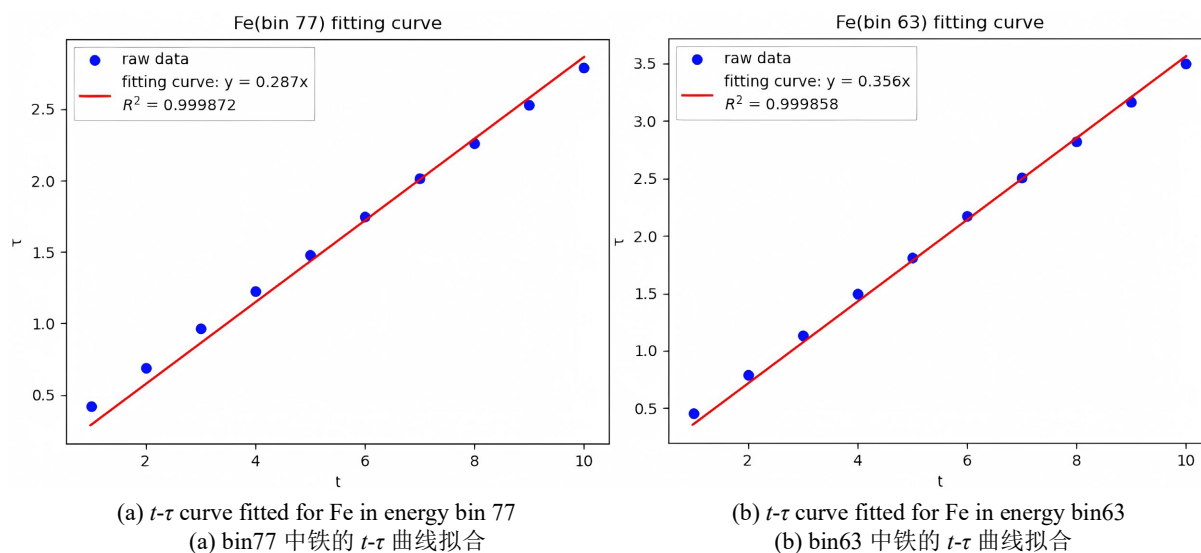


Figure 9. Best linear fit curve for the iron sample

图 9. 铁样本的最佳线性拟合曲线

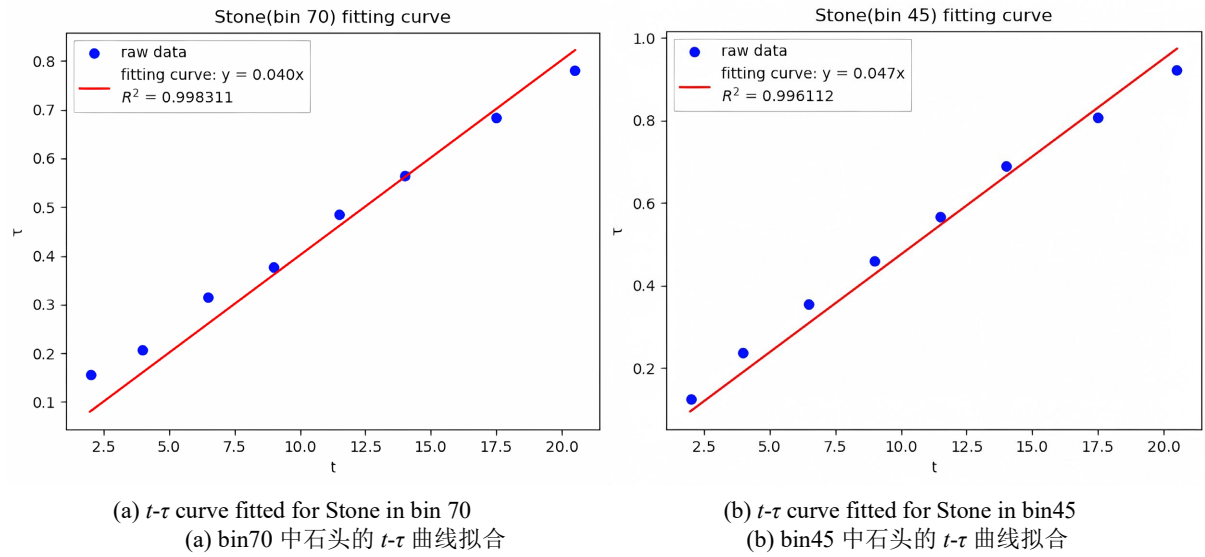


Figure 10. Best linear fit curve for the stone sample
图 10. 石样本的最佳线性拟合曲线

通过分析铜、铁和石头的光学厚度数据，已选取线性度最优的各自前 8 个能区的衰减系数 $\mu(E)$ 。由于铜、铁和石头的线性度较好的能区存在重叠，因此对选取的 $\mu(E)$ 取并集，共获得 19 个独立的 $\mu(E)$ ，分别为 $\mu(E_{\text{bin } 39})$, $\mu(E_{\text{bin } 41})$, $\mu(E_{\text{bin } 45})$, $\mu(E_{\text{bin } 51})$, $\mu(E_{\text{bin } 59})$, $\mu(E_{\text{bin } 63})$, $\mu(E_{\text{bin } 70})$, $\mu(E_{\text{bin } 73})$, $\mu(E_{\text{bin } 75})$, $\mu(E_{\text{bin } 76})$, $\mu(E_{\text{bin } 77})$, $\mu(E_{\text{bin } 78})$, $\mu(E_{\text{bin } 79})$, $\mu(E_{\text{bin } 80})$, $\mu(E_{\text{bin } 81})$, $\mu(E_{\text{bin } 83})$, $\mu(E_{\text{bin } 84})$, $\mu(E_{\text{bin } 85})$, $\mu(E_{\text{bin } 89})$ 。通过公式(5)，在理想情况下，可以解出铜板厚度、铁板厚度和石片厚度。

$$\begin{cases} \tau(E_{\text{bin } 39}) = \mu_{\text{Cu}}(E_{\text{bin } 39})t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E_{\text{bin } 39})t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E_{\text{bin } 39})t_{\text{Stone}} \\ \tau(E_{\text{bin } 41}) = \mu_{\text{Cu}}(E_{\text{bin } 41})t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E_{\text{bin } 41})t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E_{\text{bin } 41})t_{\text{Stone}} \\ \tau(E_{\text{bin } 45}) = \mu_{\text{Cu}}(E_{\text{bin } 45})t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E_{\text{bin } 45})t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E_{\text{bin } 45})t_{\text{Stone}} \\ \tau(E_{\text{bin } 51}) = \mu_{\text{Cu}}(E_{\text{bin } 51})t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E_{\text{bin } 51})t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E_{\text{bin } 51})t_{\text{Stone}} \\ \vdots \\ \tau(E_{\text{bin } 89}) = \mu_{\text{Cu}}(E_{\text{bin } 89})t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E_{\text{bin } 89})t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E_{\text{bin } 89})t_{\text{Stone}} \end{cases} \quad (5)$$

在许多相关文献中[13]-[15]，公式(5)通常用于材料分解，即通过已知厚度的切片解算物质成分。在这种方法中，衰减系数 $\mu(E)$ 可以在特定厚度下较为精确地测量。然而，本研究通过巧妙地拟合衰减系数 $\mu(E)$ ，有效地减弱了其厚度之间的耦合性，使其趋向于厚度无关量。更进一步，我们创新性地公式(5)应用于厚度估计中。

然而，根据理论公式(6)计算的理论值 τ_{ideal} ，与实际测得的 τ_{actual} 存在一定差异(见图 11)。以 bin39 为例，图 11 展示了在 bin39 下 τ_{ideal} 和 τ_{actual} 的差异。横坐标表示从实验数据中获得的 980 个数据条目，每个条目对应不同厚度的铜、铁和石片的衰减叠加组合所产生的 τ 。这种差异可能来源于噪声的影响，以及拟合得到的 $\mu(E)$ 未能完全去除非线性因素的影响。如果此时直接将 τ_{actual} 带入公式(5)，并使用 Python 中 scipy 库的 nnls 非负最小二乘法函数进行计算，则实际厚度值与计算出的厚度值之间会产生显著差异，如图 12 所示。

$$\tau_{\text{ideal}}(E) = \mu_{\text{Cu}}(E)t_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Fe}}(E)t_{\text{Fe}} + \mu_{\text{Stone}}(E)t_{\text{Stone}} \quad (6)$$

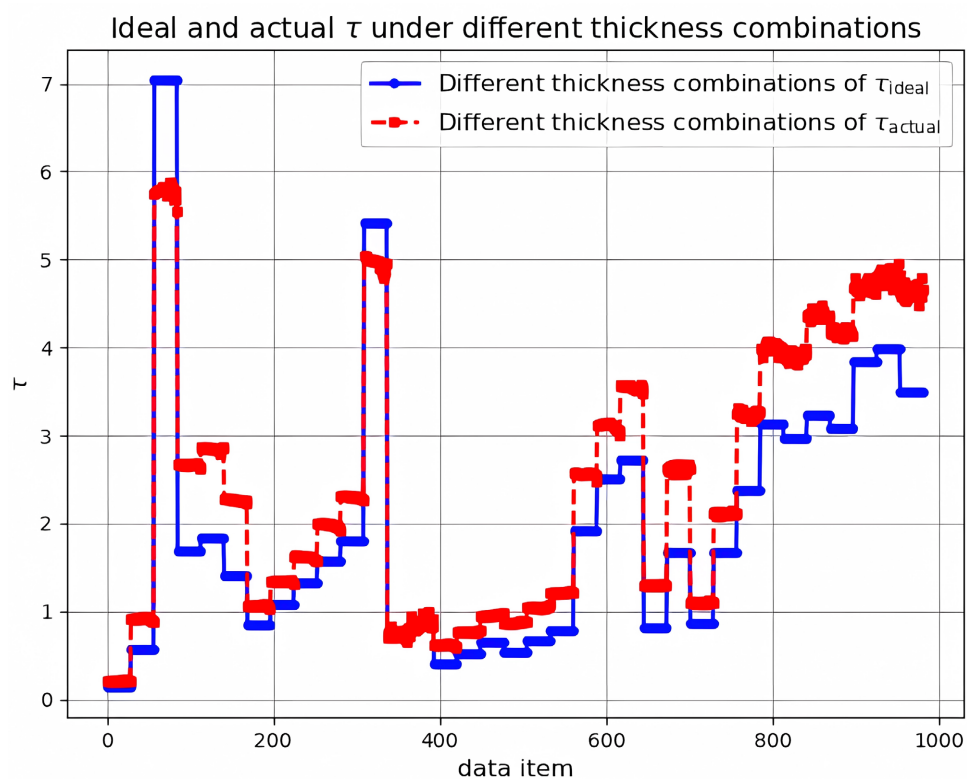
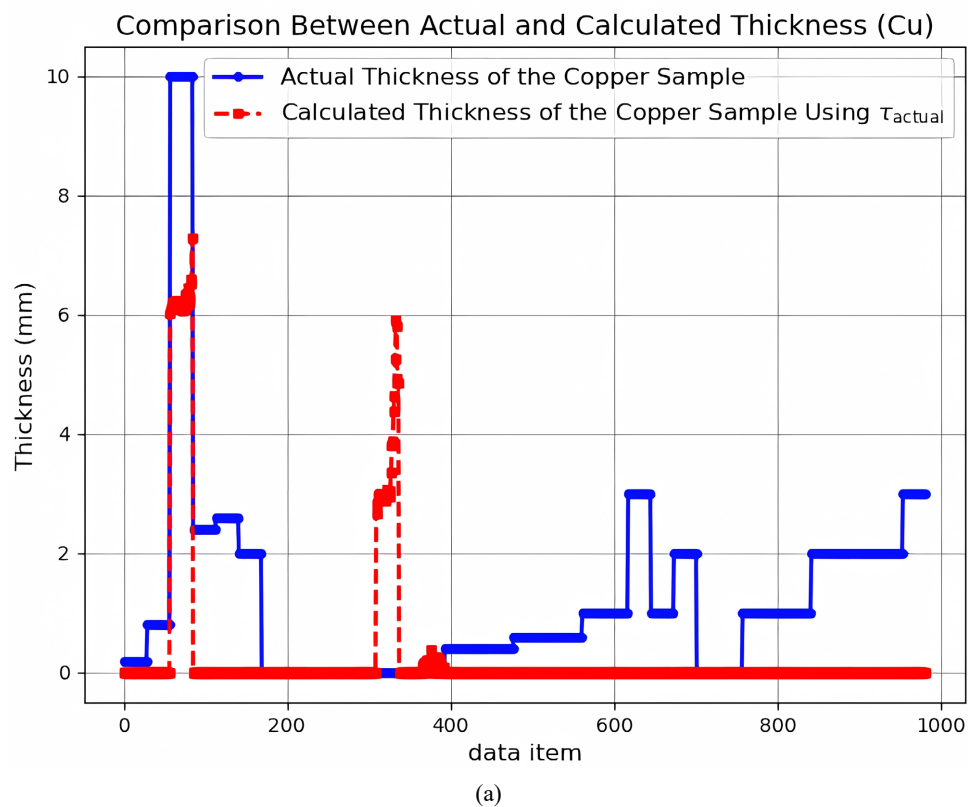


Figure 11. Ideal and actual τ under different thickness combinations

图 11. 不同厚度组合下的理想和实际 τ



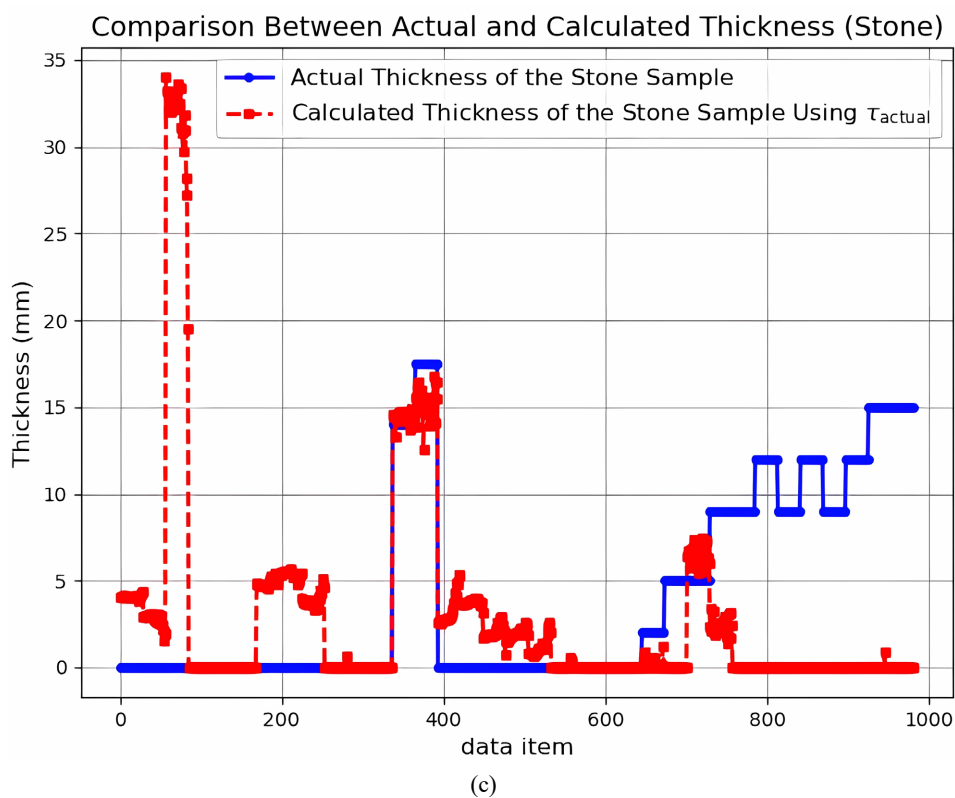
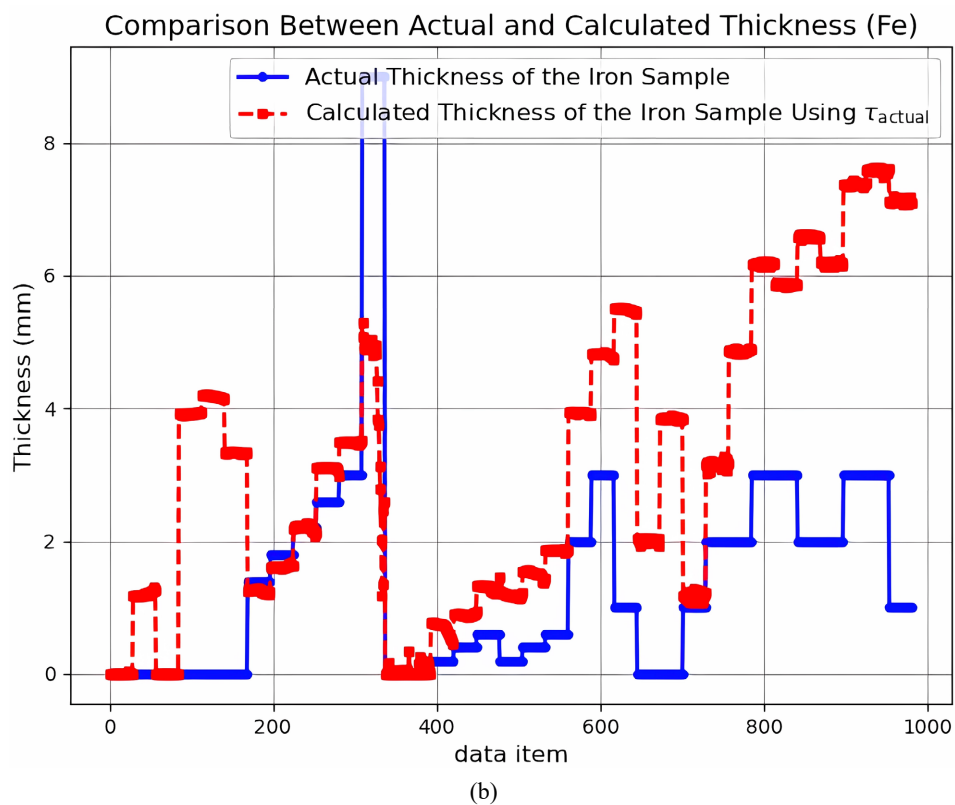


Figure 12. Comparison of actual and calculated thickness based on τ_{actual}

图 12. 基于实际 τ_{actual} 的实际和计算厚度的比较

为了消除 τ_{ideal} 与 τ_{actual} 的差异, 去除潜在的噪声与非线性因素影响, 我们定义了公式(7)。其中, 函数 \mathcal{G} 用于一定程度上消除噪声和非线性因素的干扰, 从而得到处理后的衰减系数 $\tau_{\text{processed}}$ 。

$$\tau_{\text{processed}} = \mathcal{G}(\tau_{\text{actual}}) \quad (7)$$

神经网络作为一种强大的工具, 能够有效地拟合输入与输出之间的关系, 因此可用于拟合函数 \mathcal{G} 。

此前, 我们已获得铜、铁、石片在 128 种厚度组合下的 32,768 个切片数据。基于这些切片数据, 我们进行了数据增强, 以生成用于训练神经网络模型的数据集。

数据增强方法如下:

若厚度组合中不包含石切片(即仅包含铜切片、铁切片或铜铁叠加切片), 针对这些切片(大小为 64×64), 按边缘像素逐步减少 1 个像素的趋势向内缩进, 进行尺度缩放。例如: 64×64 、 62×62 、 $60 \times 60 \cdots$ 直到 10×10 , 共生成 28 个切片。通过不同尺度的无材料时切片和 X 射线透过材料后的切片, 并应用公式(3), 对于每个厚度组合, 可以得到 28 个衰减向量, 每个衰减向量对应其在 128 个能区的衰减系数 τ 。

针对包含石切片的厚度组合(大小为 28×28), 采用随机选择法, 从每个切片中随机选取 400 个像素, 迭代选择 28 次。这样, 对于每个厚度组合, 同样可以生成 28 个衰减向量。

至此, 对于 128 个厚度组合, 每个厚度组合将生成 28 条衰减向量数据, 数据总条目为 3584, 构成输入数据。标签数据则通过此前拟合出的 $\mu(E)$ 和公式(6)计算得到 τ_{ideal} 。同样地, 针对 128 个厚度组合, 生成包含 τ_{ideal} 的标签数据, 共 3584 条。

为保证数据集和验证集的种类多样性, 首先将数据集整体划分为 7 类: 仅铜板数据、仅铁板数据、仅石片数据、铜板 + 铁板数据、铜板 + 石片数据、铁板 + 石片数据, 以及铜板 + 铁板 + 石片数据。每个类别中包含不同厚度的组合数据。然后, 在每个类别中随机划分 70% 的数据到训练集, 30% 的数据到验证集。最终, 训练集占整体数据的 70%, 验证集占 30%。这一划分方法不仅确保了训练集和验证集都涵盖各种叠加情况, 从而保证了数据的多样性, 还通过不同厚度组合的划分, 避免了训练集与验证集的重叠, 从而有助于验证模型的泛化能力。

最终, 训练集包含 2604 条数据, 验证集包含 980 条数据。

经过上述数据处理后, 我们构建了一个神经网络模型对数据进行训练与评估, 具体结果将在 3.1 节中详细讨论。

3. 结果与讨论

3.1. 模型评估

在完成数据集的准备和划分工作后, 我们对数据进行了神经网络建模与训练, 以验证模型的性能并实现目标变量的预测。

所构建的神经网络模型包含输入层和输出层, 节点数均为 19, 表示网络的输入和输出维度。模型设计了两个隐藏层, 每个隐藏层包含 128 个节点。损失函数选用均方误差损失函数(MSELoss), 训练上限为 10,000 个 epoch。为了避免过拟合, 训练过程中引入早停策略: 若验证集损失(val loss)在连续 1000 个 epoch 内未出现下降, 则提前终止训练。

经训练, 模型在验证集上的最终损失(val loss)为 0.00199, 表明网络具有较强的泛化能力, 并能有效地适应不同的数据模式。

在图 11 中, 我们展示了训练前 τ_{actual} 与 τ_{ideal} 的对比。为了进一步评估模型的性能, 图 13 展示了训练后 $\tau_{\text{processed}}$ 与 τ_{ideal} 的对比(以 bin39 为例)。通过与图 11 的对比, 我们可以清晰地看到模型在训练后如何有效调整其参数, 从而更好地拟合 τ_{ideal} 。这种对比验证了模型优化的效果, 并且训练后参数的接近度显著

提升, 表明模型在处理实际数据时具有更强的泛化能力, 能够更准确地预测和调整实际观测结果。

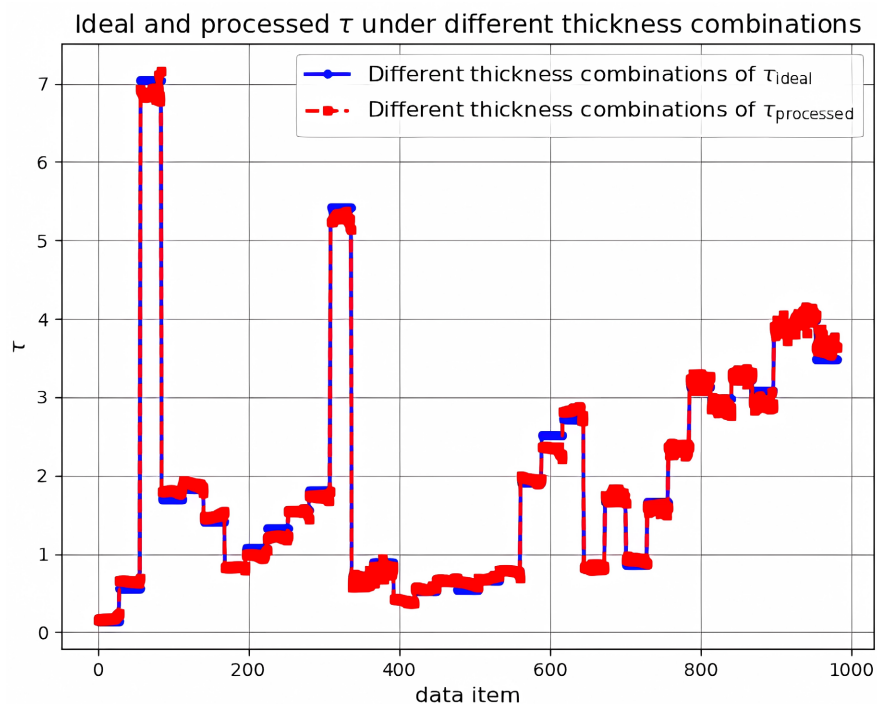
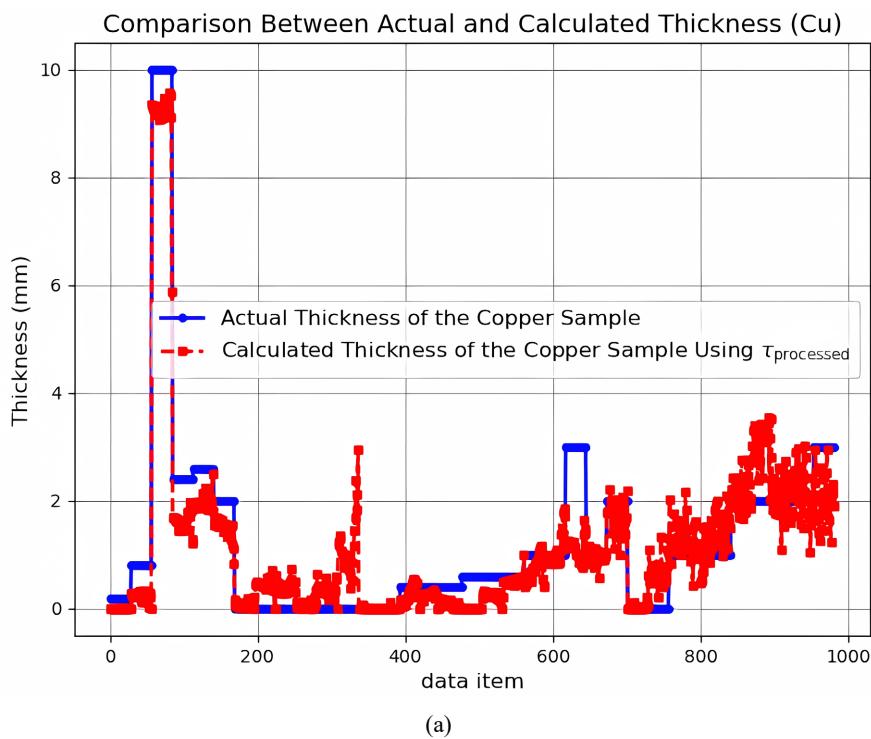


Figure 13. Ideal and processed τ under different thickness combinations

图 13. 不同厚度组合下的理想和处理后的 τ

3.2. 厚度估计



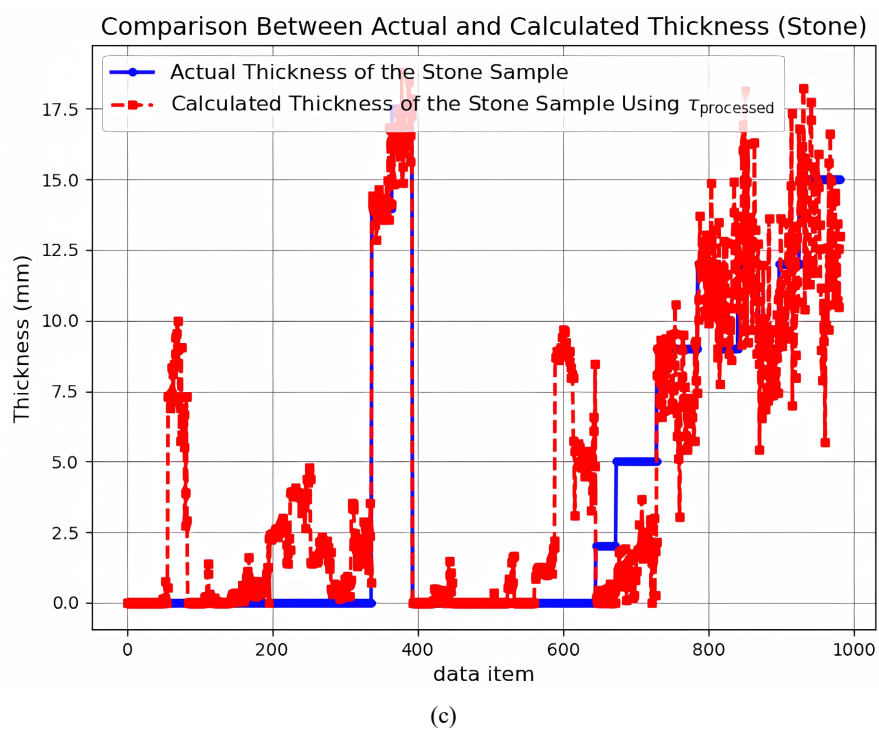
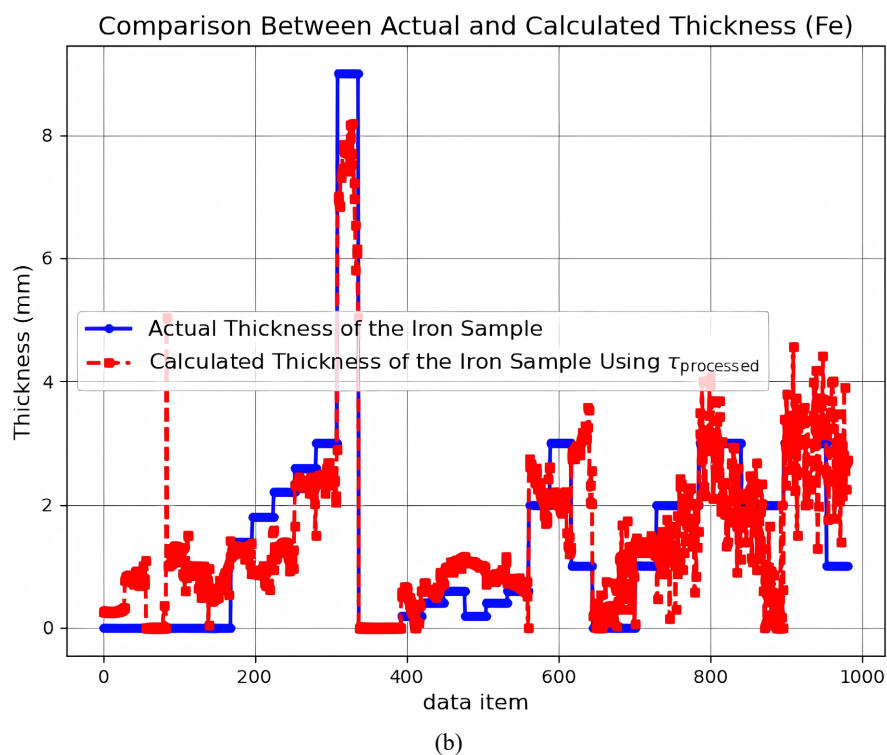


Figure 14. Comparison of actual and calculated thickness based on $\tau_{processed}$

图 14. 基于处理后的 $\tau_{processed}$ 的实际和计算厚度的比较

在验证集上,我们将神经网络模型预测的 $\tau_{processed}$ 代入 Python 的 scipy 库中的非负最小二乘函数(nls), 分别计算出铜板、铁板和石片在不同厚度组合叠加时的厚度。厚度计算结果如图 14 所示, 并且计算了铜

板、铁板和石片的 RMSE。RMSE (Root Mean Squared Error) 是一种衡量预测值与实际值之间差异的标准。其值越小，表示模型的预测效果越好。在本研究中，我们计算了铜板、铁板和石片的 RMSE 值，分别用于评估模型在不同材料上的预测精度，见表 2。结果显示，通过 $\tau_{\text{processed}}$ 计算得到的厚度与实际值具有较高的一致性，表明模型对参数的拟合效果较好。与图 12 的厚度估计结果相比，图 14 的厚度估计表现出极大的提升，显著减少了偏差，展现了模型在处理实际数据中的强大能力。通过图 14 可以看出，相比于铜和铁的厚度估计，石头厚度的估计稍显不足，具体表现为厚度估计误差较大的数据条目相对更多。进一步分析其原因，可能与石片测试体的制作方式有关。由于测试体为人工手动制作，其密度分布可能存在不均，从而引入了额外误差。然而，由于石头的密度较小，在实际应用中，石头厚度估计的误差对整体结果的影响较为有限，且在一定程度上可以被抵消。

Table 2. RMSE of copper, iron, and stone samples
表 2. 铜、铁和石头样本的均方根误差(RMSE)

Sample	RMSE
Copper	0.6296
Iron	0.8855
Stone	2.7977
Total	1.7328

4. 结论

本研究通过光子计数探测器采集铜、铁和石头样本在 128 个能量区间下的不同厚度组合数据。为了简化模型，假设每个能量区间的 X 射线可以近似为单色射线，并选择了铜、铁和石头的线性最佳能区进行衰减系数拟合，进而建立了厚度估计方程组。随后，使用神经网络模型对参数进行了校正，有效地去除了潜在的噪声和非线性因素的影响。将修正后的参数代入厚度估计方程组，通过非负最小二乘法(NNLS)计算，得出了铜、铁和石头的厚度估计值。实验结果表明，模型能够较为精确地估计各样本的厚度，铜的 RMSE 为 0.6296，铁的 RMSE 为 0.8855，石头的 RMSE 为 2.7977，验证了模型的有效性和良好的预测能力。

本研究表明，基于光子计数探测器和机器学习方法，能够有效地估算铜、铁和石头在叠加状态下的厚度分布，具有较强的应用潜力。未来的研究将进一步使用大功率射线源以增加数据集的厚度组合，从而提高衰减系数的计算精度。同时，考虑与相关机构合作，压制更大且更标准化的石头测试体，预计将显著提升估算准确性。

参考文献

- [1] Craddock, P.T. and Meeks, N.D. (1987) Iron in Ancient Copper. *Archaeometry*, **29**, 187-204. <https://doi.org/10.1111/j.1475-4754.1987.tb00411.x>
- [2] Robben, C. and Wotruba, H. (2019) Sensor-Based Ore Sorting Technology in Mining—Past, Present and Future. *Minerals*, **9**, Article 523. <https://doi.org/10.3390/min9090523>
- [3] Schena, G., Chiaruttini, C., Dreossi, D., Olivo, A. and Pani, S. (2002) Grade of Fine Composite Mineral Particles by Dual-Energy X-Ray Radiography. *International Journal of Mineral Processing*, **67**, 101-122. [https://doi.org/10.1016/s0301-7516\(02\)00037-6](https://doi.org/10.1016/s0301-7516(02)00037-6)
- [4] Scott, P.D., Krastev, E. and Nordson Dage, P.E. (2016) 2D X-Ray Inspection with Materials and Thickness Identification. *Surface Mounting Technology*, **32**, 70-79.
- [5] Yeyu, Y., Wenbao, J., Daqian, H., Aiyun, S., Can, C., Mengcheng, Q., *et al.* (2021) Feasibility Study of a Method for

- Identification and Classification of Magnesium and Aluminum with ME-XRT. *Journal of Instrumentation*, **16**, P11041. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/16/11/p11041>
- [6] Sim, L.M., Tan, T.C., Mon, A.A. and Wong, B.S. (2009) X-Ray Absorption-Based Technique to Measure the Thickness of Multi-Layered Structures. *NDT & E International*, **42**, 291-296. <https://doi.org/10.1016/j.ndteint.2008.12.002>
- [7] Schumacher, D., Zscherpel, U. and Ewert, U. (2016) Photon Counting and Energy Discriminating X-Ray Detectors—Benefits and Applications. *19th World Conference on Non-Destructive Testing (WCNDT 2016)*, Munich, 13-17 June 2016, 1-10.
- [8] Nakamura, Y., Higaki, T., Kondo, S., Kawashita, I., Takahashi, I. and Awai, K. (2022) An Introduction to Photon-Counting Detector CT (PCD CT) for Radiologists. *Japanese Journal of Radiology*, **41**, 266-282. <https://doi.org/10.1007/s11604-022-01350-6>
- [9] Takezawa, T., Uemoto, M. and Itoh, K. (2014) Combination of X-Ray Transmission and Eddy-Current Testing for the Closed-Loop Recycling of Aluminum Alloys. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, **17**, 84-90. <https://doi.org/10.1007/s10163-013-0228-4>
- [10] Hubbell, J. H. (1969) Photon Cross Sections, Attenuation Coefficients and Energy Absorption Coefficients. National Bureau of Standards Report NSRDS-NBS29, Washington DC.
- [11] Rajendran, K., Walsh, M.F., de Ruiter, N.J.A., Chernoglazov, A.I., Panta, R.K., Butler, A.P.H., *et al.* (2014) Reducing Beam Hardening Effects and Metal Artefacts in Spectral CT Using Medipix3RX. *Journal of Instrumentation*, **9**, P03015. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/9/03/p03015>
- [12] Rebuffel, V., Tartare, M., Brambilla, A., Moulin, V. and Verger, L. (2014) Multi-Energy X-Ray Techniques for NDT: A New Challenge. *11th European Conference on Non-Destructive Testing (ECNDT 2014)*, Prague, 6-10 October 2014, 1-10.
- [13] Wu, X., He, P., Long, Z., Guo, X., Chen, M., Ren, X., *et al.* (2019) Multi-Material Decomposition of Spectral CT Images via Fully Convolutional DenseNets. *Journal of X-Ray Science and Technology: Clinical Applications of Diagnosis and Therapeutics*, **27**, 461-471. <https://doi.org/10.3233/xst-190500>
- [14] Clark, D.P., Holbrook, M. and Badea, C.T. (2018) Multi-Energy CT Decomposition Using Convolutional Neural Networks. *Medical Imaging 2018: Physics of Medical Imaging*, Houston, 10-15 February 2018, 415-423. <https://doi.org/10.1117/12.2293728>
- [15] Abascal, J.F.P.J., Ducros, N., Pronina, V., Rit, S., Rodesch, P., Broussaud, T., *et al.* (2021) Material Decomposition in Spectral CT Using Deep Learning: A Sim2Real Transfer Approach. *IEEE Access*, **9**, 25632-25647. <https://doi.org/10.1109/access.2021.3056150>